F1509/ME

R

48. 1986.

BULETINUL INSTITUTULUI POLITEHNIC BUCUREȘTI

1988-03-30

MŰSZAKI EGYETEM KÖNYVTÁR BUDAPEST 1848

METALURGIE

TOMUL XLVIII, ANUL 1986

COMITETUL DE REDACȚIE

REDACTOR RESPONSABIL : Prof. dr. ing. *Voicu Tache*
MEMBRII : Prof. dr. ing. *Constantin Bălă* ; Conf. dr. ing. *Cornel Berbente* ; Prof. dr. docent *Gheorghe Buzdugan*, membru corespondent al Academiei R. S. România ; Prof. dr. ing. *Ioan Carabogdan* ; Prof. dr. ing. *Sergiu Călin* (secretar științific) ; Prof. dr. docent *Virgil Constantinescu* ; Prof. dr. docent *Felicia Cornea* ; Prof. dr. ing. *Alexandru Dănescu* ; Prof. dr. docent *Traian Demian* (redactor responsabil adjunct) ; Prof. dr. ing. *Octavian Floarea* ; Prof. dr. ing. *Julieta Florea* ; Prof. dr. ing. *Nicolae Geru* ; Prof. dr. ing. *Berthold Grünwald* ; Prof. dr. *Ion Grădișteanu* ; Prof. dr. ing. *Gheorghe Hortopan* ; Prof. dr. ing. *Moise Ienciu* ; Prof. dr. ing. *Vlad Ionescu* ; Prof. dr. ing. *Adelaida Mateescu* ; Prof. ing. *Jean Moncea* ; Prof. dr. ing. *Nicolae Murguleț* ; Prof. dr. docent *Florea Oprea* ; Prof. dr. ing. *Aurel Oprean* ; Prof. dr. ing. *Mircea Petrescu* ; Prof. dr. ing. *Ion Popescu* ; Conf. dr. ing. *Mircea Radeș* ; Conf. dr. ing. *Sorin Roșca* ; Prof. dr. ing. *George Rulea* ; Prof. dr. ing. *Marcel Segărceanu* ; Prof. dr. ing. *Alexandru Spătaru* ; Prof. dr. *Octavian Stănășilă* ; Prof. dr. docent *Ion Teoreanu* ; Prof. dr. docent *Andrei Țugulea* ; Prof. dr. ing. *Silvia Vacu* ; Prof. dr. docent *Rodica Vîlcu* ; Academician *Radu Voinea*.

Editor : Institutul Politehnic București
Splaiul Independenței 313, Tel. 31.40.10. România, Căsuța poștală 2356

Readers from abroad can get subscriptions for this newspaper through ROMPRESFILATELIA, Import export press, P.O. Box 12-201, Telex 10378, Calea Griviței 62—64, Bucharest, ROMANIA

Sumar

M. Geanău

Asupra unor proprietăți ale G-obiectelor într-un topos elementar (l.franceză) . . . 3

Mihaela Bugeanu

Efecte de conjugare în sistemele ftalimidice. 9

D. Taloi

Utilizarea funcțiilor spline bicubice în calcule termodinamice referitoare la sistemele ternare 13

C. Dumitrescu, Gh. Albiţa, M. Rădulescu

Influența structurii asupra comportării la uzare a materialelor metalice. 25

I. Drăgan, Mihaela Isac

Studii și cercetări experimentale privind tratamentul termic al oțelurilor de înaltă rezistență slab aliate și microaliate cu bor 35

N. Atanasiu

Echilibrul dinamic al dornului flotant la tragerea țevilor. 45

D. Taloi

Utilizarea funcțiilor spline în calcule termo 55

V. Brabie, P. Toboc, G. Neagu

Posibilități de obținere a unor fonte de înaltă puritate pentru turnătorie. 63

C. Bratu, L. Sofroni

Cercetarea procesului de solidificare a cilindrilor de laminor prin utilizarea modelului fizic cu transport de substanță 70

Gh. Ene

Determinarea presiunilor exercitate de materialele pulverulente și granulare asupra pereților buncărelor cilindrice și prismatice. 83

V. Lavric, O. Munteanu

Ecuațiile caracteristice ale reactoarelor biochimice ideale continue 89

1509
FOLYÓIRAT
BUDAPEST 1848

Summary

M. Geanău

On Some Properties of G-Objects in Elementary Topoy 3

Mihaela Bugeanu

Substituent Effects in Ftalimide Systems 9

D. Taloi

Use of Spline Functions in Thermodynamic Calculations Concerning to Thernary Systems 13

C. Dumitrescu, Gh. Albiţa, M. Rădulescu

The Influence of Structure on the Metals Wear 25

I. Drăgan, Mihaela Isac

Experimental Researches for Heat Treatment of High Strength Low and Bor Micro-alloyed Steels 35

N. Atanasiu

The Dynamical Stability of the Floating Plug During Tubes Drawing 45

D. Taloi

Use of Spline Functions in Thermodynamic Calculations 55

V. Brabie, P. Toboc, G. Neagu

Hot Metal Desulphurization and Dephosphorization by Injection of Na_2CO_3 and CaO 63

C. Bratu, L. Sofroni

Research of the Solidification Process of Mill Cylinders with the Help of a Physical Model with Substance Transport 70

Gh. Ene

The Determination of the Powder and Granular Materials Pressure to the Cylindrical and Prismatical Walls of the Bunkers 83

V. Lavric, O. Munteanu

The Caracteristic Equations of the Ideal Continuous Biochemical Reactors 89

C. Z.: 515.122

SUR QUELQUES PROPRIÉTÉS DES G-OBJETS DANS UN TOPOS ÉLÉMENTAIRE

MIRCEA GEANĂU *

Le but de cet ouvrage est de construire dans un topos élémentaire, un objet ayant des propriétés analogues aux celles du produit tensoriel des modules. Ce résultat est une généralisation de celui obtenu par Giraud-Grothendieck.

Dans cet article les notations suivantes seront utilisées : $\mathcal{E}$ est un topos élémentaire, G un objet groupe du topos $\mathcal{E}$, (P, W_P) un G-objet à droite de $\mathcal{E}$ et (Q, W_Q) un G-objet à gauche du $\mathcal{E}$.

Définition 1. On appelle action diagonalle de G sur le produit direct $P \times Q$, le morphisme obtenu par la composition des suivantes morphismes :

$$P \times Q \times G \xrightarrow{<p_1 p_3 p_2>} P \times G \times Q \xrightarrow{1_P \times \Delta \times 1_Q} P \times G \times G \times Q$$

$$\xrightarrow{1_P \times 1_G \times a \times 1_G} P \times G \times G \times Q \xrightarrow{W_P \times W_Q} P \times G$$

p_j sont les projections canoniques du produit $P \times Q \times G$, Δ_G est le morphisme diagonal et a est le morphisme d'inversion du G. On vérifie aisément que $P \times Q$ est un G-objet à droite. On désigne par $d : P \times Q \times G \to P \times Q$ le morphisme obtenu ainsi.

Soit R l'image inverse de l'objet $P \times Q$ par le morphisme $1_{P \times Q} \times d$, c'est à dire R est le produit fibré suivant :

$$\begin{array}{ccc} R & \longrightarrow & P \times Q \\ {\scriptstyle i}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle \Delta_{P \times Q}} \\ P \times Q \times P \times Q \times G & \xrightarrow{1_{P \times Q} \times d} & P \times \quad Q \times P \times Q \end{array}$$

* Assist. dr., Chaire de Mathématiques

Le diagramme suivant est commutatif :

$$\begin{array}{ccc} R & \longrightarrow & \exists_p(R) = \mathrm{Im}(pi) \\ {\scriptstyle i}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle j} \\ P\times Q\times P\times Q\times G & \xrightarrow[p=<t_1,t_2,t_3,t_4>]{} & P\times Q\times P\times Q \underset{<p_3,p_4>}{\overset{<p_1,p_2>}{\rightrightarrows}} P\times Q \end{array}$$

Définition 2. Soit P un G-objet à droite et Q un G-objet à gauche. On appelle le produit diagonal du P et du Q et on le designe par $P \otimes_G Q$, l'objet définit par le conoyau des morphismes $\langle p_1, p_2\rangle j$, $\langle p_3, p_4\rangle j$.

$$\exists_p(R) \underset{<p,p_4>j}{\overset{<p_1,p_2>j}{\rightrightarrows}} P\times Q \xrightarrow{\mu} P\otimes_G Q = \mathrm{coker}\,(\langle p_1, p_2\rangle j, \langle p_3, p_4\rangle j$$

Exemple. Soit P un G-ensemble à droite et Q un G-ensemble à gauche. L'action diagonalle du groupe G sur le produit $P\times Q$ est defini ainsi $(p, q)g = (pg, g^{-1}q)$. La relation d'équivalence ρ induite par l'action du groupe G sur le produit $P \times Q$ est donnée par la relation $(p, q)\,\rho(p'q') \Leftrightarrow \exists g \in G$ tel que $(p, q) = (p', q')g \Leftrightarrow (p, q) = (p'g, g^{-1},q')$.

Alors $P\otimes_G Q = \dfrac{P\times Q}{\rho}$, c'est à dire l'orbite du G-ensemble $P\times Q$.

Observation. $P \otimes_G Q$ n'est pas un G-objet parce que $1_{P\times Q}\times d$ n'est pas un morphisme des G-objets, donc R n'est pas un G-objet et par conséquant il n'y a pas une action canonique de G sur $P\otimes_G Q$.

Proposition 1. Soit P un G-objet à droite et soit Q un G-objet à gauche et un H-objet à droite (H este un objet groupe dans $\mathfrak{S}$). Alors $P\otimes_G Q$ est un H-objet à droite.

Démonstration. On définit l'action du H sur l'objet $P\times Q\times P\times Q\times G$ par la composition des morphismes

$$P\times Q\times P\times Q\times G\times H \xrightarrow{1_{P\times Q\times P\times Q\times G}\times\Delta_H} P\times Q\times P\times Q\times G\times H\times H$$

$$\xrightarrow{<\xi_1,\xi_2,\xi_7,\xi_3,\xi_4,\xi_6,\ s>} P\times Q\times H\times P\times Q\times H\times Q$$

$$\xrightarrow{1_P\times W_Q^H\times 1_P\times W_Q^H\times 1_G} P\times Q\times\times Q\times G.$$

(ξ_i, $i = 1,\ldots 7$ sont les projections du $P\times Q\times P\times Q\times G\times H\times H$ et $W_Q^H : Q\times H\to H$ est l'action de H sur l'objet Q. On vérifie aisément que $P\times \times Q\times P\times Q\times G$ est un H-objet à droite. $P\times Q$ est aussi un H-objet à droite dont l'action est donée par $W_{P\times Q}^H = 1_P\times W_Q^H : P\times Q\times H \to P\times Q$. Analogiquement $P\times Q\times P\times Q$ est un H-objet à droite dont le morphisme $W_{P\times Q\times P\times Q}^H : P\times Q\times P\times Q\times H\to P\times Q\times P\times Q$ est obtenu par la com-

position des morphismes suivantes:

$$P\times Q\times P\times Q\times H \xrightarrow{1_{P\times Q\times P\times Q}\times\Delta_H} P\times Q\times P\times Q\times H\times H \xrightarrow{\langle p_1,p_2,p_5,p_3,p_4,p_6\rangle}$$

$$P\times Q\times H\times P\times Q\times H \xrightarrow{1_P\times W_Q^H\times 1_P\times W_Q^H} P\times Q\times P\times Q$$

(p_i, $i=1,\ldots 6$, sont les projections canoniques de $P\times Q\times P\times Q\times H\times H$). On vérifie aisément que les morphismes $\Delta_{P\times Q}$ et $1_{P\times Q}\times d$ sont des homomorphismes des H-objets. Alors R étant un produit fibré est un H-objet et i est un morphisme des H-objets.

Le morphisme $p=\langle p_1, p_2, p_3, p_4\rangle : P\times Q\times P\times Q\times G\to P\times Q\times P\times Q$ est aussi un morphisme des H-objets; donc il résulte que $\exists_p(R)=\mathrm{Im}\,(pi)$ est un H-objet. Les morphismes $\langle p_1, p_2\rangle j$ et $\langle p_3, p_4\rangle j$ sont des morphismes de G-objets étant obtenus par la composition des morphismes des G-objets; dont il résulte que leur conoyau $P\otimes_G Q$ est un H-objet et μ est un morphisme des H-objets.

D'après ce qui précède $P\otimes_G G$ est un G — objet à droite obtenu en faisant G un G-objet à droite.

Proposition 2. Soit $u: P\to P'$ un morphisme des G-objets à droite et soit $v: Q\to Q'$ un morphisme des G-objets à gauche. Dans ces conditions il y a un seul morphisme $u\otimes v: P\otimes_G Q\to P'\otimes_G Q'$, qui rend le diagramme suivant commutatif:

$$\begin{array}{ccc} P\times Q & \xrightarrow{\mu} & P\otimes_G Q \\ \downarrow{\scriptstyle u\times v} & & {\scriptstyle u}\downarrow\otimes v \\ P'\times Q' & \xrightarrow{\mu'} & P'\otimes_G Q' \end{array}$$

La démonstration est laissé au lecteur. On designe par $\check{P}$ (respectivement $\check{Q}$) l'objet à opérateurs à gauche (respectivement à droite) defini par $(P,\ \check{w}_p: G\times P\to G)$ où $\check{W}_P$ est le morphisme composé

$$G\times P \xrightarrow[\sim]{\langle p_2,p_1\rangle} P\times G \xrightarrow{1_P\times a} P\times G \xrightarrow{w_P} P$$

Proposition 3. Soit P un G-objet à droite et soit Q un G-objet à gauche. Alors, il y a un isomorphisme canonique $P\otimes_G Q\xrightarrow{\sim}\check{Q}\otimes_G\check{P}$.

Démonstration. Dans le topos $\mathcal{E}$ il y a un isomorphisme de symétrie $\langle p_2, p_1\rangle$; $P\times Q_1\xrightarrow{\sim}\check{Q}\times\check{P}$. Alors, $R\approx\check{R}$ ou $\check{R}$ est la relation induite par l'action diagonalle d, du groupe G sur le produit $\check{Q}\times\check{P}$.

$$\begin{array}{ccc} R & \xrightarrow{\quad} & \check{Q}\times\check{P} \\ {\scriptstyle\check{i}}\downarrow & \text{pr. f} & \downarrow{\scriptstyle\Delta_{Q\times P}} \\ \check{Q}\times\check{P}\times\check{Q}\times\check{P}\times G & \xrightarrow[1_{\check{Q}\times\check{P}}\times d]{} & \check{Q}\times\check{P}\times\check{Q}\times\check{P} \end{array}$$

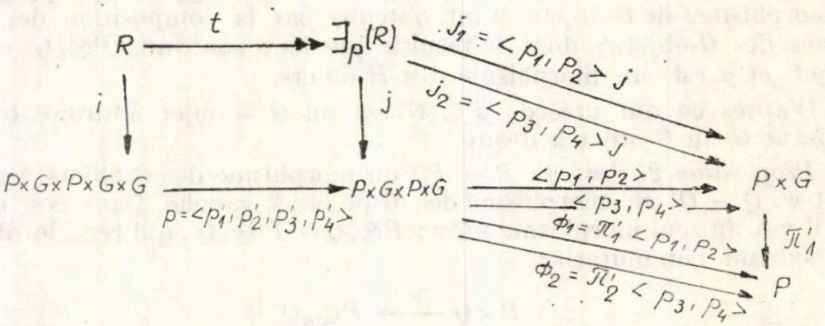
On a l'isomorphisme $\exists_p(R) = \exists_{\check{p}}(R)$ cu $\check{p} = \langle \check{p}_1, \check{p}_2, \check{p}_3, \check{p}_4 \rangle$ et $\check{p}_i$, $= 1, \ldots, 5$, sont les projections du $\check{Q} \times \check{P} \times \check{Q} \times \check{P} \times G$.

Donc il résulte que coker $(\langle p_1, p_2 \rangle j, \langle p_3, p_4 \rangle j)$ est isomorphe au coker $(\langle \check{p}_1, \check{p}_2 \rangle \check{j}, \langle \check{p}_3, \check{p}_4 \check{j})$.

Proposition 4. Soit P un G-objet à droite et soit $P \otimes_G G$ considéré comme G-objet à droite. Dans ces conditions le morphisme $\mu \langle 1_P, \varepsilon\omega_P \rangle : P \to P \otimes_G G$ est un isomorphisme.

Démonstration. D'abord on va montrer que les morphisme composé $P \xrightarrow{\langle 1_P, \varepsilon\omega_P \rangle} P \times G \xrightarrow{\mu} P \otimes_G G$ est un monomorphisme et pour cela il suffit de montrer qu'il y a un morphisme $\overline{\pi}'_1 : P \otimes_G G \to P$ telque $\overline{\pi}'_1 \mu = \pi'_1$. En effet, dans cette situation, on a l'égalité $\overline{\pi}'_1 \mu \langle 1_P, \varepsilon\omega_P \rangle = \pi'_1 \langle 1_P, \varepsilon\omega_P \rangle = 1_P$ et donc il suffit de montrer l'existence du morphisme $\overline{\pi}'_1$.

De la construction du produit diagonal $P \otimes_G G$ il résulte que le diagramme suivant est commutatif.



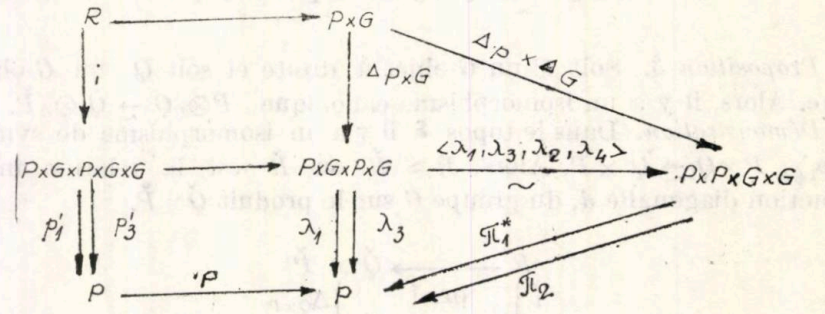
Pour que le morphisme $\overline{\pi}'_1$ existe il faut que la relation $\pi'_1 j_1 = \pi'_2 j_2$ soit accomplie.

Parce que t est un épimorphisme il suffit de vérifier l'égalité $\pi'_1 j_1 t = \pi'_{22} j_2 t$ ce qui est équivalent à la relation $\Phi_1 pi = \Phi_2 pi$.

On a $\Phi_1 pi = \pi'_1 \langle p_1, p_2 \rangle \langle p'_1, p'_2, p'_3, p'_4 \rangle \, i = \pi'_1 \langle p'_1, p'_2 \rangle \, i = p'_1 i$

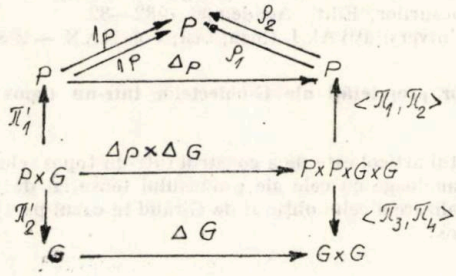
$$\Phi_2 pi = \pi'_1 \langle p_3, p_4 \rangle \langle p'_1, p'_2, p'_3, p'_4 \rangle \, i = \pi'_1 \langle p'_3, p'_4 \rangle \, i = p'_3 i$$

Donc il faut vérifier l'égalité $p'_1 i = p'_3 i$ et pour celà on doit montrer que dans le diagramme suivant le carré situé en bas à gauche est commutatif :



(p'_i, $i = 1, \ldots 5$ sont les projections du produit $P \times G \times P \times G \times G$, λ_i, $i = 1, \ldots 4$, celles du $P \times G \times P \times G$, π_i, $i = 1, \ldots 4$, celles du $P \times P \times G \times G$.

Le diagramme suivant est commutatif



(ρ_i sont les projections du $P \times P$).

Nous allons vérifier seulement la commutativité du rectangle situé en haut; d'une manière analogue on peut démontrer la commutativité du celui situé en bas.

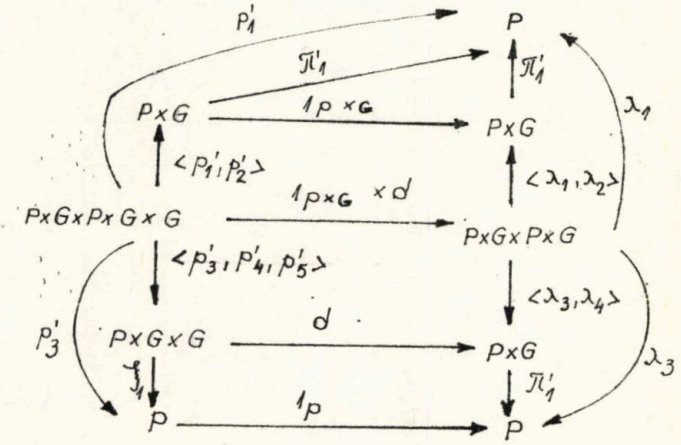
Des égalités :

$$\pi_1(\Delta_P \times \Delta_G) = \rho_1 \langle \pi_1, \pi_2 \rangle (\Delta_P \times \Delta_G) = \rho_1 \Delta_P \pi_1' = \pi_1'$$

$$\pi_2(\Delta_P \times \Delta_G) = \rho_2 \langle \pi_1, \pi_2 \rangle) \Delta_P \times \Delta_G) = \rho_2 \Delta_P \pi_1' = \pi_1'$$

il résulte la commutativité du rectangle situé en haut.

Le diagramme suivant est commutatif



Donc il résulte $p_1' = \lambda_1(1_{P \times G} \times d)$ et $p_3' = \lambda_3(1_{P \times G} \times d)$ ce qui montre que le carré (I) est commutatif et donc il y a le morphisme $\overline{\pi}_1' : P \otimes_G G \to P$, qui vérifie l'égalité $\overline{\pi}_1' \mu = \overline{\pi}_1'$.

On va montrer que le morphisme $\mu < 1_P, \ \varepsilon \omega_P >$ est une retracte est pour cela il suffit de vérifier la relation $\mu < 1_P, \varepsilon \omega_P > \overline{\pi}_1' = 1_{P \otimes G}$.

On vérifie aisément la dernière relation.

BIBLIOGRAPHIE

1. *J. Giraud*, Cohomologie non abélienne, Springer — Verlag, 1971
2. *Al. Radu*, Teoria toposurilor, Edit. Academiei 1982—82.
3. *M. Geanău*, Analele Universității Al. I. Cuza, Iași, Vol. XXX — 2 S. I.

Asupra unor proprietăți ale G-obiectelor într-un topos elementar

Scopul acestui articol este de a construi într-un topos eleme ntar, un obiect având proprietăți analoage cu cele ale produsului tensorial de mo dele. Acest rezultat este o generalizare a celui obținut de Giraud în cazul particu lar al toposului Giraud-Grothendick.

C. Z.: 668.813.7

EFECTE DE CONJUGARE ÎN SISTEMELE FTALIMIDICE

MIHAELA BUGEANU*

În lucrarea prezentă s-a căutat să se evidenţieze cîteva aspecte structurale legate de efecte de substituent ca şi caracterul parţial de transfer al benzii a III-a ce apare în derivaţii ftalimidei.

Introducere

Sistemele ftalimidice au fost mult studiate în literatură sub aspectul proprietăţilor lor structurale.

În acest sens se menţionează studiile spectrale în UV-Vis, care pun în evidenţă structura de benzi a sistemelor ftalimidice [1—2].

S-a subliniat de asemenea, din punct de vedere teoretic, natura benzilor existente, indicîndu-se [3] caracterul $n - \pi^*$ al acestora.

Discuţii în legătură cu banda a doua şi eventual a III-a au fost purtate în literatură, menţionîndu-se caracterul de parţial transfer al acesteia [4].

Polaritatea moleculelor a fost relevată prin determinările de moment dipolar [3], iar efectele substituentului asupra frecvenţelor fundamentale (în special $\gamma c = 0$) sînt menţionate în studii IR [5].

Avînd în vedere importanţa teoretică a studiului structurii electronice a derivaţilor ftalimidei, în lucrarea prezentă s-a căutat să se evidenţieze cîteva aspecte structurale legate de efecte de substituent ca şi caracterul parţial de transfer al benzii a III-a ce apare în aceşti derivaţi ai ftalimidei.

Parte experimentală

Derivaţii luaţi în studiu au fost purificaţi prin recristalizare din metanol la cald.

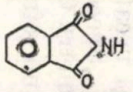
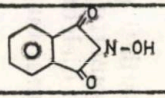
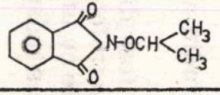
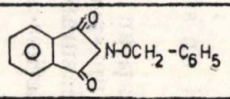
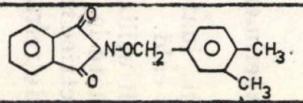
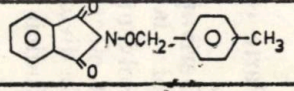
Solvenţii utilizaţi au fost distilaţi şi uscaţi. Măsurătorile spectrale au fost efectuate la un spectrofotometru „Specord" UV—VIS, iar constantele dielectrice măsurate cu un dielcometru Oehme 600 RL.

Indicii de refracţie s-au măsurat cu un refractometru Abbé.

* Asist. dr., catedra Fizică

TABEL 1 - MAXIMELE DE ABSORBȚIE ALE SISTEMELOR FTALMIDICE

IN DIVERSI SOLVENȚI

	Regiunea I								Regiunea II			
	Benzen	Dioxan	CCl_4	$CHCl_3$	CH_3OH	C_2H_5OH	H_2O	H_2O+HCl (0,1n)	Benzen	Cloroform	Alcool met.	Apă +sol HCl
	218	219	220	222	225	227	230	231	250-265	252-268	254-269	255-280
	225	227	228	230	231	232	234	238	258-269	259-271	261-279	265-280
	213	216	218	220	222	225	228	230	261-275	262-278	265-280	268-282
	219	221	222	225	227	230	231	235	256-272	258-275	259-278	261-281
	216	218	219	221	222	225	227	229	258-281	259-285	260-288	265-290
	214	215	217	219	220	225	228	231	262-282	265-285	267-287	271-291

S-a lucrat în domeniul de concentrații $10^{-3} - 10^{-4}$ mol/l pentru momentele de dipol și de $10^{-5} - 10^{-4}$ mol/l în cazul măsurătorilor spectrale.

Metoda pentru determinarea momentului dipolar a fost Guggenheim.

În determinarea caracterului benzii a III-a s-a lucrat în mediu acid (HCl 0,1 N).

Spectrele IR s-au efectuat în pastilă la un spectrofotometru „Specord IR" urmărindu-se regiunea 1600—1800 cm^{-1}.

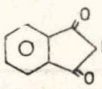
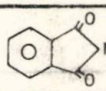
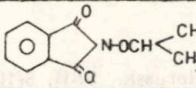
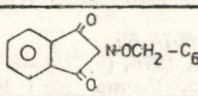
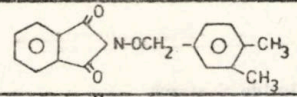
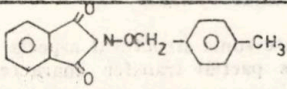
Rezultate experimentale și discuții

În tabelul 1 sînt prezentate principalele benzi obținute în cazul sistemelor ftalimidice. Studiul a fost efectuat în diverși solvenți, urmărindu-se siftul cu polaritatea la fiecare bandă.

Sifturile sînt mai pronunțate la benzile II și III și foarte mici la banda I, dovedind o structură de bandă benzenică, puțin afectate de polaritatea solventului.

Benzile sînt grupate pe regiuni. Prima regiune 220—230 nm, este comună tuturor derivaților luați în studiu, pe care am presupus-o drept bandă benzenică.

TABEL 2 - Momente de dipol în seria ftalimidelor

Sistemul	μ_{exp}	μ_{teor}
	5.80	5.91
	6.10	6.40
	5.08	5.35
	3.72	3.91
	3.80	3.78
	2.85	2.85

A doua regiune este situată între 250—268 şi este deplasată mai puternic cu solventul în jur de 20 nm.

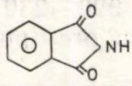
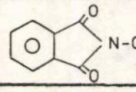
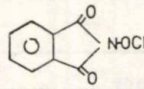
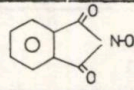
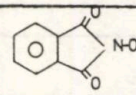
Benzile din regiunea a II -a, ce apare în special în solvenţi nepolari în concentraţii de 10^{-3} mol/l au o intensitate mai mică. Se presupun a fi cu caracter de transfer sînt deplasate în jur de 50 de nm cu polaritatea şi suferă o exaltare în mediu acid.

Momentele dipolare prezentate în tabelul 2 reflectă foarte bine efectul substituentului asupra polarităţii moleculei. Se remarcă o scădere a polarităţii o dată cu introducerea substituentului atrăgător de electroni.

Spectrul IR reflectă foarte bine modul în care substituenţii afectează vibraţia „stretching" a grupării Carbonil. Acest mod este prezentat în tabelul 3.

TABEL 3

Deplasările de frecvenţă pentru vibraţie de întindere simetrică a legăturii C = O, cu natura substituentului ($\Delta\nu C=O$ cm^{-1})

Sistemul	$\Delta\nu C=O$ (cm^{-1})
	12
	13,5
	12,7
	11,5
	11,8

BIBLIOGRAFIE

1. *L. G. Pikulik, L. F. Gladehenka,* Dokl. Ackad. Nauk Belorussk, SSR, 8(10) 641—4) (1964).
2. *Grammaticakies Panos,* C. R. Acad. Sci, Ser, C, 1971, 272(7) 657—60.
3. *V. Galasso, G. Pappalardo,* J. Chem. Soc. Perkin Trans., 2, 1976, (5) 774—8.
4. *L. I. Pavlinov, L. V. Papulova, J. Stepan,* AE Vapr. Fiz. Foemo[illegible] i Fazov, Prevrashchenii Kalinin 1978. 127—32.,
5. *Y. Hase,* Eletica Quim., 1978, 3, 47—53.

Substituent Effects in Phtalimide Systems

In thd prezent work, we try to evidentiate some structural aspects correlated with subsituent effects on molecule, as partial transfer character of third band from phtalimide derivatives.

C. Z.: 518.12: 536.7

UTILIZAREA FUNCȚIILOR SPLINE BICUBICE ÎN CALCULE TERMODINAMICE REFERITOARE LA SISTEMELE TERNARE

D. TALOI*

În cadrul lucrării este prezentată o nouă modalitate de calcul al activității componenților în sisteme ternare prin utilizarea funcțiilor spline de două variabile (bicubice).

Sînt prezentate principalele relații privind stabilirea funcției spline bicubice, precum și modalitățile de aplicare practică la studiul sistemelor ternare, în cadrul lucrării exemplificarea efectuîndu-se pe sistemul $Cu_2S-FeS-Fe$.

1. Noțiuni introductive

Fie $\Omega \subset R^2$ un domeniu mărginit. Se notează cu $C_2^4(\Omega)$ mulțimea funcțiilor $f: \Omega \to R$, $(x, y) \to f(x, y)$, ale căror derivate parțiale pînă la ordinul patru nu mai mult de două ori în raport cu fiecare variabilă, există și sînt continue pe Ω.

Se presupune în continuare că domeniul Ω este rectangular, adică $\Omega := \{(x, y) \in R^2 | a \leqslant x \leqslant b;\ c \leqslant y \leqslant d\}$. Se consideră diviziunile unidimensionale Δ_x și Δ_y determinate de punctele $\Delta_x : a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b$; $\Delta_y : c = y_0 < y_1 < \ldots < y_M = d$, care generează o diviziune bidimensională a lui Ω pe care o notăm $\pi := \Delta_x x \Delta_y$ și care este formată din punctele $\pi := \{P_{ij} | P_{ij} = (x_i, y_j), 0 \leqslant i \leqslant N, \quad 0 \leqslant j \leqslant M\}$ [1].

Diviziunea π împarte pe Ω într-o familie de dreptunghiuri Ω_{ij} definite astfel:

$$\Omega := \{(x, y) \in \Omega \mid x_{i-1} \leqslant x \leqslant x_i;\ y_{j-1} \leqslant y \leqslant y_j\}.$$

Prin definiție, o funcție $S_\pi : \Omega \to R$ se numește funcție spline cubică de două variabile (sau funcție spline bicubică) în raport cu diviziunea π, dacă satisface condițiile:

a) $S_{\pi|\Omega_{ij}}$ este un polinom de grad cel mult trei în variabilele x și y.

b) $S_\pi \in C_2^4(\Omega)$.

Funcțiile spline de două variabile constituie un instrument util pentru interpolarea funcțiilor de două variabile.

---

* Conf. dr. ing., catedra Metalurgia metalelor neferoase

2. Stabilirea funcției spline bicubice

Funcția spline bicubică S_π se numește funcție spline de interpolare pe diviziunea π dacă satisface condițiile:

$$S_\pi(x_i, y_j) = z_{ij}, \quad 0 \leqslant i \leqslant N; 0 \leqslant j \leqslant M.$$

Problema care trebuie rezolvată este de a găsi funcția spline bicubică de interpolare pe punctele diviziunii π pentru mulțimea de numere reale z_{ij}, z_{ij} fiind considerate valorile unei funcții $z(x, y)$ pe nodurile (x_s, y_j) date.

În rezolvarea acestei probleme se pornește de la premiza că funcțiile care exprimă variația derivatelor parțiale de ordinul doi pe domeniile Ω_{ij} sînt liniare. Ele se notează cu S''_x, respectiv S''_y, cu S'_x și S'_y se notează funcțiile care exprimă variația derivatelor parțiale de ordinul întîi, iar funcția spline bicubică de interpolare pe diviziunea π se notează cu S_π.

Se fac următoarele notații referitoare la derivatele parțiale de ordinul doi ale funcției $z(x, y)$ în punctul de coordonate (x_i, y_j), în raport cu x respectiv y: $z''_{ij(x)} = z''(x_i, y_j)_x = M_{ij}$; $z''_{ij(y)} = z''(x_i, y_j)_y = N_{ij}$; $0 \leqslant i \leqslant N$; $0 \leqslant j \leqslant M$.

Scriind ecuația planului care trece prin punctele A, B, C de coordonate $(x_{i-1}, y_{j-1}, M_{i-1,j-1})$, $(x_{i-1}, y_j, M_{i-1,j})$, (x_i, y_j, M_{ij})(fig. 1), ecuație care

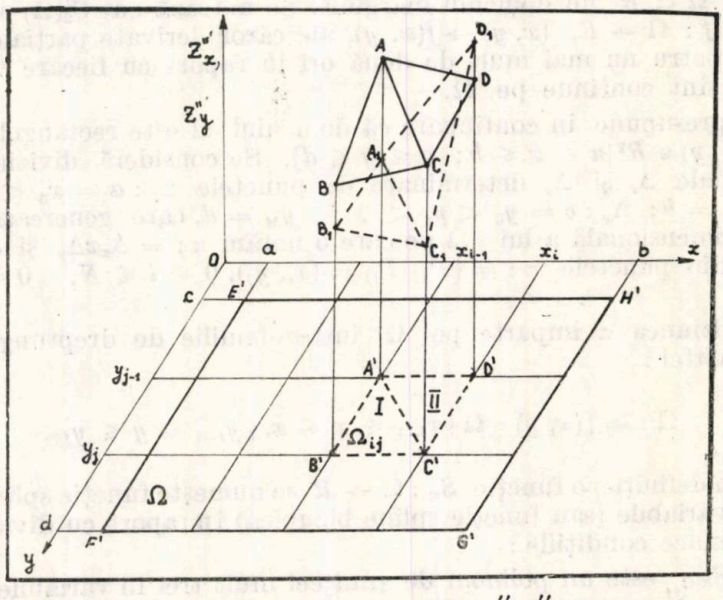


Fig. 1 — Reprezentarea grafică a funcțiilor z''_x, z''_y definite pe domeniul Ω_{ij}.

$A' \equiv P_{i-1,j-1}$; $\| AA' \| = M_{i-1,j-1}$; $\| A_1A' \| = N_{i-1,j-1}$;
$B' \equiv P_{i-1,j}$; $\| BB' \| = M_{i-1,j}$; $\| B_1B' \| = N_{i-1,j}$;
$C' \equiv P_{ij}$; $\| CC' \| = M_{ij}$; $\| C_1C' \| = N_{ij}$;
$D' \equiv P_{i,j-1}$; $\| DD' \| = M_{i,j-1}$; $\| D_1D' \| = N_{i,j-1}$.

aproximează funcţia z''_x, rezultă :

$$\begin{vmatrix} x - x_{i-1} & y - y_{j-1} & S''_x - M_{i-1,j-1} \\ x - x_i & y - y_j & S''_x - M_{ij} \\ x - x_{i-1} & y - y_j & S''_x - M_{i-1,j} \end{vmatrix} = 0 \tag{1}$$

sau

$$S''_x = M_{ij}\frac{x - x_{i-1}}{h_i} + M_{i-1,j}\frac{x_i - x}{h_i} - (M_{i-1,j} - M_{i-1\,j-1})\frac{y_j - y}{k_j} \tag{2}$$

în care $h_i = x_i - x_{i-1}$, $k_j = y_j - y_{j-1}$.

În mod analog, ecuaţia planului care trece prin punctele A, C, D, de coordonate $(x_{i-1}, y_{j-1}, M_{i-1,\,j-1})$, (x_i, y_j, M_{ij}), $(x_i, y_{j-1}, M_{i,\,j-1})$ este de forma :

$$S''_x = M_{i-1,j-1}\frac{x_i - x}{h_i} + M_{i,j-1}\frac{x - x_{i-1}}{h_i}(M_{ij} - M_{,ij-1})\frac{y - y_{j-1}}{k_j} \tag{3}$$

În ceea ce priveşte ecuaţiile care aproximează funcţia z''_y pe domeniul Ω_{ij} acestea au următorul aspect :

$$S''_y = N_{ij}\frac{x - x_{i-1}}{h_i} + N_{i-1,j}\frac{x_i - x}{h_i} - (N_{i-1,j} - N_{i-1,j-1})\frac{y_j - y}{k_j} \tag{4}$$

$$S''_y = N_{i-1,j-1}\frac{x_i - x}{h_i} + N_{i,j-1}\frac{x - x_{i-1}}{h_i} + (N_{ij} - N_{i,j-1})\frac{y - y_{j-1}}{k_j} \tag{5}$$

De menţionat că funcţiile (2) şi (4) sînt definite pe domeniul $A'B'C(\Omega^I_{ij})$ iar funcţiile (3) şi (5) pe domeniul $A'C'D'(\Omega''_{ij})$.

Integrînd de două ori relaţia (2) se obţine :

$$S'_x = M_{ij}\frac{(x - x_{i-1})^2}{2h_i} - M_{i-1,j}\frac{(x_i - x)^2}{2h_i} + (M_{i-1,j} - M_{i-1,j-1})\frac{(x_i - x)(y_j - y)}{k_j}$$

$$- A_1(y_j - y)^2 + B_1(y - y_{j-1})^2 + C_1. \tag{6}$$

$$S_\pi = M_{ij}\frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + M_{i-1,j}\frac{(x_i - x)^3}{6h_i} - (M_{i-1,j} - M_{j-1,j-1}).$$

$$\cdot\frac{(x_i - x)^2(y_i - y)}{2k_j} + A_1(x_i - x)(y_j - y)^2 + B_1(x - x_{i-1})(y - y_{j-1})^2 +$$

$$+ C_1 x + f_1(y). \tag{7}$$

Procedînd similar cu relaţia (4) rezultă :

$$S'_y = N_{ij}\frac{(x - x_{i-1})(y - y_{j-1})}{h_i} - N_{i-1,j}\frac{(x_i - x)(y_j - y)}{h_i} + \tag{8}$$

$$+ (N_{i-1,j} - N_{i-1,j-1})\frac{(y_j - y)^2}{2k_j} - A_2(x_i - x^2) + B_2$$

$$S_\pi = N_{ij}\frac{(x-x_{i-1})(y-y_{j-1})}{2h_i} + N_{ij}\frac{(x_i-x)(y_j-y)^2}{2h_i} -$$

$$-(N_{i-1,j}-N_{i-1,j-1})\frac{(y_j-y)^3}{6k_j} + A_2(x_i-x)^2(y_j-y) + B_2 y + f_2(x) \tag{9}$$

Pentru determinarea constantelor de integrare, ţinînd cont de faptul că relaţiile (7) şi (9) reprezintă aceeaşi funcţie, se derivează funcţia (7) în raport cu y şi se identifică cu (8), iar derivata în raport cu x a funcţiei (9) se identifică cu (6).
Rezultă :

$$A_1 = \frac{N_{i-1,j}}{2h_i};\ A_2 = -\frac{1}{2k_j}(M_{i-1,j}-M_{i-1,j-1});\ B_1 = \frac{N_{ij}}{2h_i} \tag{10}$$

$$f_1'(y) = (N_{i-1,j}-N_{i-1,j-1})\frac{(y_i-y)^2}{2k_j} + B_2 \tag{11}$$

$$f_2'(x) = M_{ij}\frac{(x-x_{i-1})^2}{2h_i} - M_{i-1,j}\frac{(x_i-x)^2}{2h_i} + C_1 \tag{12}$$

Prin integrarea relaţiilor (11) şi (12) se obţin funcţiile $f_1(y)$ şi $f_2(x)$

$$f_1(y) = -(N_{i-1,j}-N_{i-1,j-1})\frac{y_j-y)^3}{6k_j} + B_2 y + C_2 \tag{13}$$

$$f_2(x) = M_{ij}\frac{(x-x_{i-1})^3}{6h_i} + M_{i-1,j}\frac{(x_i-x)^3}{6h_i} + C_1 x + C_3 \tag{14}$$

care, introduse în relaţiile (7) şi (9) şi ţinînd cont de (10), permit determinarea funcţiei spline

$$S_{\pi|\Omega I\,ij} = M_{ij}\frac{(x-x_{i-1})^3}{6h_i} + M_{i-1,j}\frac{(x_i-x)^3}{6h_i} -$$

$$-(N_{i-1,j}-N_{i-1,j-1})\frac{(y_j-y)^3}{6k_j} - (M_{i-1,j}-M_{i-1,j-1})\cdot$$

$$\cdot = \frac{(x_i-x)^2(y_j-y)}{2k_j} + \frac{N_{ij}}{2h_i}(x-x_{i-1})(y-y_{j-1})^2 +$$

$$+\frac{N_{i-1,j}}{2h_i}(x_i-x)(y_j-y)^2 + C_1 x + B_2 y + C_3 \tag{15}$$

(Din identificarea relaţiilor (7) şi (9) a rezultat $C_2 = C_3$).

Pentru a determina constantele de integrare C_1, B_2 şi C_3 se scrie relaţia (15) în punctele de coordonate (x_{i-1}, y_{j-1}), (x_{i-1}, y_j), (x_i, y_j), unde funcţia spline de interpolare trebuie să aibă valorile date ale funcţiei z, adică : $S_\pi(x_{i-1}, y_{j-1}) = z_{i-1,j-1}$; $S_\pi(x_{i-1}, y_j) = z_{i-1,j}$; $S_\pi(x_i, y_j) = z_{ij}$.

Se obţine astfel un sistem de trei ecuaţii cu trei necunoscute

$$C_1 x_{i-1} + B_2 y_{j-1} + C_3 = z_{i-1,j-1} - \frac{h_i^2}{6}(3M_{i-1,j-1} - 2M_{i-1,j}) -$$

$$- \frac{k_j^2}{6}(2N_{i-1,j} + N_{i-1,j-1})$$

$$C_1 x_{i-1} + B_2 y_j + C_3 = z_{i-1,j} - \frac{h_i^2}{6} M_{i-1,j} \tag{16}$$

$$C_1 x_i + B_2 y_j + C_3 = z_{ij} - \frac{h_i^2}{6} M_{ij} - \frac{k_j^2}{2} N_{ij}$$

care se rezolvă, iar valorile constantelor C_1, B_2 şi C_3

$$C_1 = \frac{1}{h_i}(z_{ij} - z_{i-1,j}) + \frac{h_i}{6}(M_{i-1,j} - M_{ij}) - \frac{k_j^2}{2h_i} N_{ij} \tag{17}$$

$$B_2 = \frac{1}{k_j}(z_{i-1,j} - z_{i-1,j-1}) - \frac{h_i^2}{2k_j}(M_{i-1,j} - M_{i-1,j-1}) + \frac{k_j}{6} \cdot$$

$$\cdot (2N_{i-1,j} + N_{i-1,j-1}) \tag{18}$$

$$C_3 = \frac{1}{h_i}(x_i z_{i-1,j} - x_{i-1} z_{ij}) - \frac{h_i^2}{6} M_{i-1,j} - \frac{x_{i-1} h_i}{6}(M_{i-1,j} - M_{ij}) +$$

$$+ \frac{x_{i-1} k_j^2}{2h_i} N_{ij} - \frac{y_j}{k_j}(z_{i-1,j} - z_{i-1,j-1}) +$$

$$+ \frac{h_i^2}{2k_j}(M_{i-1,j} - M_{i-1,j-1}) - \frac{y_j k_j}{6}(2N_{i-1,j} + N_{i-1,j-1}) \tag{19}$$

se introduc în relaţiile (6), (8) şi (15) care capătă următoarea formă :

$$S'_x = M_{ij}\frac{(x - x_{i-1})^2}{2h_i} - M_{i-1,j}\frac{(x_i - x)^2}{2h_i} + (M_{i-1,j} - M_{i-1,j-1}) \cdot$$

$$\cdot \frac{(x_i - x)(y_j - y)}{k_j} - \frac{N_{i-1,j}}{2h_i}(y_j - y)^2 + \frac{N_{ij}}{2h_i}(y - y_{j-1})^2 +$$

$$+ \frac{h_i}{6}(M_{i-1,j} - M_{ij}) + \frac{z_{ij} - z_{i-1,j}}{h_i} - \frac{k_j^2}{2h_i} N_{ij} \tag{20}$$

$$S'_y = N_{ij}\frac{(x - x_{i-1})(y - y_{j-1})}{h_i} - N_{i-1,j}\frac{(x_i - x)(y_j - y)}{h_i} +$$

$$+ (N_{i-1,j} - N_{i-1,j-1})\frac{(y_j - y)^2}{2k_j} + (M_{i-1,j} - M_{i-1,j-1})\frac{(x_i - x)^2}{2k_j} +$$

BUDAPESTI MŰSZAKI EGYETEM 1848

$$+\frac{z_{j-1,j}-z_{i-1,j-1}}{k_j}-\frac{h_i^2}{2k_j}(M_{i-1,j}-M_{i-1,j-1})+$$

$$+\frac{k_j}{6}(2N_{i-1,j}+N_{i-1,j-1}) \tag{21}$$

$$S_{\pi/\Omega_{ij}^{I}}=M_{ij}\frac{(x-x_{i-1})^3}{6h_i}+M_{i-1,j}\frac{(x_i-x)^3}{6h_i}-(N_{i-1,j}-N_{i-1,j-1})\cdot$$

$$\cdot\frac{(y_j-y)^3}{6k_j}-(M_{i-1,j}-M_{i-1,j-1})\frac{(x_i-x)^2(y_j-y)}{2k_j}+$$

$$+\frac{N_{ij}}{2h_i}(x-x_{i-1})(y-y_{j-1})^2+\frac{N_{i-1,j}}{2h_i}(x_i-x)(y_j-y)^2+$$

$$+\frac{x-x_{i-1}}{h_i}(z_{ij}-z_{i-1,j})+\frac{(x-x_{i-1})h_i}{6}(M_{i-1,j}-M_{ij})-$$

$$-\frac{(x-x_{i-1})k_j^2}{2h_i}N_{ij}-\frac{y_j-y}{k_j}(z_{i-1,j}-z_{i-1,j-1})+$$

$$+\frac{(y_i-y)h_i^2}{2k_j}(M_{i-1,j}-M_{i-1,j-1})-\frac{(y_j-y)k_j}{6}(2N_{i-1,j}+N_{i-1,j-1})-$$

$$-\frac{h_i^2}{6}M_{i-1,j}+z_{i-1,j}. \tag{22}$$

În mod analog, integrînd de două ori relațiile (3) și (5) și efectuînd toate calculele necesare se obține funcția spline de interpolare pe domeniul Ω_{ij}^{II} $(A'C'D')$ (fig. 1), de forma

$$S_{\pi/\Omega_{ij}^{II}}=\frac{M_{i,j-1}}{6h_i}(x-x_{i-1})^3+\frac{M_{i-1,j-1}}{6h_i}(x_i-x)^3+$$

$$\frac{N_{ij}-N_{i,j-1}}{6k_j}(y-y_{j-1})^3+\frac{N_{i,j-1}}{2h_i}(x-x_{i-1})(y-y_{j-1})^2+$$

$$+\frac{N_{i-1,j-1}}{2h_i}(x_i-x)(y_j-y)^2+$$

$$+\frac{M_{i,j}-M_{i,j-1}}{2k_j}(x-x_{i-1})^2(y-y_{j-1})-(x_i-x)\left[\frac{z_{i,j-1}+z_{i-1,1j-1}}{h_i}-\right.$$

$$\left.-\frac{h_i(M_{i,j-1}-M_{i-1,j-1})}{6}+\frac{k_j^2N_{i-1,j-1}}{2h_i}\right]+(y-y_{j-1})\left[\frac{z_{ij}-z_{i,j-1}}{k_j}-\right.$$

$$\left.-\frac{h_i^2(M_{ij}-M_{i,j-1})}{2k_j}-\frac{k_j(2N_{i,j-1}+N_{ij})}{6}\right]-\frac{h_i^2}{6}M_{i,j-1}+z_{i,j-1}, \tag{23}$$

precum și derivatele ei parțiale de ordinul întîi în raport cu x și y :

$$S'_x = M_{i,j-1}\frac{(x-x_{i-1})^2}{2h_i} - M_{i-1,j-1}\frac{(x_i-x)^2}{2h_i} + (M_{ij}-M_{i,j-1})\cdot$$

$$\cdot\frac{(x-x_{i-1})(y-y_{j-1})}{k_j} - N_{i-1,j-1}\frac{(y_j-y)}{2h_i} + N_{i,j-1}\frac{(y-y_{j-1})^2}{2h_i} +$$

$$+\frac{1}{h_i}(z_{i,j-1}-z_{i-1,j-1}) - \frac{h_i}{6}(M_{i,j-1}-M_{i-1,j-1}) + \frac{k_j^2}{2h_i}N_{i-1,j-1}\cdot \qquad (24)$$

$$S'_k = N_{i,j-1}\frac{(x-x_{i-1})(y-y_{j-1})}{h_i} - N_{i-1,j-1}\frac{(x_i-x)(y_j-y)}{h_i} +$$

$$+(N_{ij}-N_{i,j-1})\frac{(y-y_{j-1})^2}{2k_j} + (M_{ij}-M_{i,j-1})\frac{(x-x_{i-1})^2}{2h_j} +$$

$$+\frac{z_{ij}-z_{i,j-1}}{k_j} - \frac{h_i^2}{2k_j}(M_{ij}-M_{i,j-1}) - \frac{k_j}{6}(2N_{i,j-1}+N_{ij}). \qquad (25)$$

Este evident că pentru a aproxima funcția $z = f(x, y)$ și derivatele sale parțiale pe tot domeniul Ω, expresiile de forma (20) — (25) vor trebui scrise corespunzător fiecărui domeniu Ω_{ij}, $i \in \{1,2,\ldots,N\}$, $j \in \{1, 2,\ldots, M\}$ și pentru a putea utiliza aceste relații de aproximare trebuie determinate valorile derivatelor parțiale de ordinul doi $z''_{ij(x)} = M_{ij}$, $z''_{ij(y)} = N_{ij}$ în punctele (x_i, y_j), $i \in \{0,1,\ldots N\}$ $j \in \{0,1,\ldots,M\}$.

Avînd în vedere că segmentele de polinoame definite pe domeniile Ω_{ij} se racordează în noduri, se poate scrie :

$$\lim_{\substack{x\to x_i;\ y\to y_j\\ x<x_i;\ y<y_j}} S'_x = \lim_{\substack{x\to x_i;\ y\to y_j\\ x>x_i\ \ y>y_j}} S'_x \qquad (26)$$

$$\lim_{\substack{x\to x_i;\ y\to y_j\\ x<x_i;\ y<y_j}} S'_y = \lim_{\substack{x\to x_i;\ y\to y_j\\ x>x_i;\ y>y_j}} S'_y \qquad (27)$$

Din relația (20) rezultă

$$\lim_{\substack{x\to x_i;\ y\to y_j\\ x<x_i;\ y<y_j}} S'_x = \frac{h_i}{6}(M_{i-1,j}+2M_{ij}) + \frac{z_{ij}-z_{i-1,j}}{h_i} \qquad (28)$$

Funcția care aproximează derivata parțială z'_x pe domeniul $\Omega_{i+1,j+1}$ este de forma (20) cu indicii scriși în mod corespunzător, adică

$$S'_x = M_{i+1,j+1}\frac{(x-x_i)^2}{2h_{i+1}} - M_{i,j+1}\frac{(x_{i+1}-x)^2}{2h_{i+1}} + (M_{i,j+1}-M_{ij})\cdot$$

$$\cdot \frac{(x_{i+1}-x)(y_{j+1}-y)}{k_{j+1}} - N_{i,j+1}\frac{(y_{j+1}-y)^2}{2h_{i+1}} + N_{i+1,j+1}\frac{(y-y_j)^2}{2h_{i+1}} +$$

$$+\frac{z_{i+1,j+1}-z_{i,j+1}}{h_{i+1}} + \frac{h_{i+1}}{6}(M_{i,j+1}-M_{i+1,j+1}) - \frac{k_{j+1}^2}{2h_{i+1}}N_{i+1,j+1} \tag{29}$$

$$\lim_{\substack{x\to x_i;\ y\to y_j\\ x>x_i;\ y>y_j}} S'_x = (4\,M_{i,j+1} - 6\,M_{ij} - M_{i+1,j+1}) - \frac{k_{j+1}^2}{2h_{i+1}}(N_{i,j+1} +$$

$$+ N_{i+1,j+1}) + \frac{z_{i+1,j+1}-z_{i,j+1}}{h_{i+1}} \tag{30}$$

Pe baza relaţiilor (26), (28) şi (30) se poate scrie egalitatea :

$$\frac{h_i}{6}(M_{i-1,j} + 2\,M_{ij}) - \frac{h_{i+1}}{6}(4\,M_{i,j+1} - 6\,M_{ij} - M_{i+1,j+1}) +$$

$$+\frac{k_{j+1}^2}{2h_{i+1}}(N_{i,j+1} + N_{i+1,j+1}) = \frac{z_{i+1,j+1}-z_{i,j+1}}{h_{i+1}} - \frac{z_{ij}-z_{i-1,j}}{h_i} \tag{31}$$

Luînd în considerare relaţiile (21) şi (27) se poate stabili o expresie similară cu (31) care are următoarea formă :

$$\frac{k_j}{6}(N_{i-1,j-1} + 2N_{i-1,j} + 6N_{ij}) - \frac{h_i^2}{2k_j}(M_{i-1,j} - M_{i-1,j-1}) +$$

$$+\frac{k_{j+1}}{6}(2N_{ij} + N_{i,j+1}) = \frac{z_{i,j+1}-z_{ij}}{k_{j+1}} - \frac{z_{i-1,j}-z_{i-1,j-1}}{k_j} \tag{32}$$

Pentru $i = 1,2,\ldots,(N-1)$ şi $j = 1, 2,\ldots,(M-1)$ se pot scrie $(N-1)(M-1)$ relaţii de tipul (31) şi $(N-1)(M-1)$ relaţii de tipul (32), iar analiza condiţiilor de la frontiera domeniului Ω conduce la obţinerea a încă $2(2M+2N)$ relaţii. Astfel, aplicînd (20) şi (21) pe domeniul Ω_{11}, $x \in [x_0, x_1]$, $y \in [y_0, y_1]$, rezultă :

$$S'_x = M_{11}\frac{(x-x_0)^2}{2h_1} - M_{01}\frac{(x_1-x)^2}{2h_1} + (M_{01}-M_{00})\frac{(x_1-x)(y_1-y)}{k_1} -$$

$$-N_{01}\frac{(y_1-y)^2}{2h_1} + N_{11}\frac{(y-y_0)^2}{2h_1} + \frac{h_1}{6}(M_{01}-M_{11}) - \frac{k_1^2}{2h_1}N_{11} +$$

$$+\frac{z_{11}-z_{01}}{h_1} \tag{33}$$

$$S'_y = N_{11}\frac{(x-x_0)(y-y_0)}{h_1} - N_{01}\frac{(x_1-x)(y_1-y)}{h_1} + (N_{01}-N_{00})\frac{(y_1-y)^2}{2k_1} +$$

$$+(M_{01}-M_{00})\frac{[(x_1-x)^2-h_1^2]}{2k_1} + \frac{k_1}{6}(2N_{01}+N_{00}) + \frac{z_{01}-z_{00}}{k_1} \tag{34}$$

Știind că

$$\lim_{\substack{x\to x_0;\ y\to y_0\\ x>x_0;\ y>y_0}} S'_x = z'_{00(x)}; \qquad \lim_{\substack{x\to x_0;\ y\to y_0\\ x>x_0;\ y>y_0}} S'_y = z'_{00(y)} \tag{35}$$

relațiile (33) și (34) devin :

$$\frac{h_1}{6}(4M_{01} - 6M_{00} - M_{11}) - \frac{k_1^2}{2h_1}(N_{01} + M_{11}) = z'_{00(x)} - \frac{z_{11} - z_{01}}{h_1} \tag{36}$$

$$\frac{k_1}{6}(2N_{00} + N_{01}) = \frac{z_{01} - z_{00}}{k_1} - z'_{00}(y) \tag{37}$$

Procedînd similar pentru toate celelalte domenii marginale Ω_{ij} $i \in \{1, 2, \ldots, N\}$, $j \in \{1, M\}$, respectiv $i \in \{1, N\}$, $j \in \{1, 2, \ldots, M\}$ se obțin în total $(2M + 2N - 1)$ relații de tipul (36) și $(2M + 2N - 1)$ relații de tipul (37).

Pentru a obține numărul necesar de relații de tipul (36) și (37), $2(2M + 2N)$, trebuie să se apeleze și la expresiile (24) și (25) astfel încît să fie cuprins și vîrful H' al dreptunghiului Ω (fig. 1).

Aplicînd funcțiile (24) și (25) pe domeniul Ω_{N1}, rezultă :

$$S'_x = M_{N0}\frac{(x - x_{N-1})^2}{2h_N} - M_{N-1,0}\frac{(x_N - x)^2}{2h_N} + (M_{N1} - M_{N0})\cdot$$

$$\cdot \frac{(x - x_{N-1})(y - y_0)}{k_1} - N_{N-1,0}\frac{(y_1 - y)^2}{2h_N} + N_{N0}\frac{(y - y_0)^2}{2h_N} +$$

$$+ \frac{1}{h_N}(z_{N0} - z_{N-1,0}) - \frac{h_N}{6}(M_{N0} - M_{N-1,0}) + \frac{k_1^2}{2h_N}N_{N-1,0} \tag{38}$$

$$S'_y = N_{N0}\frac{(x - x_{N-1})(y - y_0)}{h_N} - N_{N-1,0}\frac{(x_N - x)(y_1 - y)}{h_N} +$$

$$+ (N_{N1} - N_{N0})\frac{(y - y_0)^2}{2k_1} + (M_{N1} - M_{N0})\frac{(x - x_{N-1})^2}{2k_1} + \frac{1}{k_1}(z_{N1} - z_{N0}) -$$

$$- \frac{h_N^2}{2k_1}(M_{N1} - M_{N0}) - \frac{k_1}{6}(2N_{N0} + N_{N1}). \tag{39}$$

Deoarece :

$$\lim_{\substack{x\to x_N;\ y\to y_0\\ x<x_N;\ y>y_0}} S'_x = z'_{N0(x)} \qquad \lim_{\substack{x\to x_N;\ y\to y_0\\ x<x_N;\ y>y_0}} S'_y = z'_{N0(y)} \tag{40}$$

relaţiile (38) şi (39) devin :

$$\frac{h_N}{6}(2\,M_{N0} + M_{N-1,0}) = z'_{N0(x)} - \frac{z_{N0} - z_{N-1,0}}{h_N} \tag{41}$$

$$\frac{k_1}{6}(2\,N_{N0} + N_{N1}) = \frac{z_{N1} - z_{N0}}{k_1} - z'_{N0(y)} \tag{42}$$

Se obţine astfel un sistem cu $2(N+1)(M+1)$ ecuaţii şi $2(N+1)(M+1)$ necunoscute : M_{ij} şi N_{ij}, $i \in \{0,1,\ldots,N\}$, $j \in [0,1,\ldots,\cdot M\}$, ale cărui soluţii permit determinarea coeficienţilor funcţiilor spline (22) şi (23). Aplicabilitatea uneia sau alteia dintre aceste funcţii depinde de relaţia dintre variabilele x şi y. Astfel, dacă $y \geqslant \frac{k_j}{h_j}(x - x_{i-1}) + y_{j-1}$ va folosi în scopuri de interpolare pe domeniul Ω_{ij} funcţia spline (22), iar dacă $y \leqslant \frac{h_j}{k_i}(x - x_{i-1}) + y_{j-1}$ se va utiliza funcţia (23).

3. Determinarea activităţii componenţilor în sistemul Cu_2S —FeS—Fe

Au fost luate în studiu topituri de sulfuri (mate) întîlnite în pirometalurgia cuprului şi s-a determinat activitatea fierului la diferite rapoarte molare FeS/Cu_2S ($x = FeS/Cu_2S$; $x \in \{1, 2, 3, 4\}$) şi la diferite concentraţii ale sulfului ($y = \%$ at. S ; $y \in \{34 ; 35 ; 36 ; 37 ; 38 ; 39\}$).

Rezultatele determinărilor experimentale sînt trecute în tabelul 1.

Domeniul de definiţie Ω este rectangular, $\Omega := \{(x, y) \in R^2 \mid 1 \leqslant x = 4 ; 34 \leqslant y \leqslant 39\}$. S-au considerat diviziunile unidimensionale Δx şi Δy determinate de punctele $\Delta x : 1 = x_0 < x_1 < x_2 < x_3 = 4$, $(h_1 = h_2 = h_3 = 1)$, $\Delta y : 34 = y_0 < y_1 < y_2 < y_3 < y_4 < y_5 = 39 (k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = k_5 = 1)$ care au generat o diviziune bidimensională a lui Ω notată cu $\pi := \Delta x \times \Delta y$, formată din punctele $\pi := \{P_{ij} \mid P_{ij} = (x_i, y_j)$, $0 \leqslant i \leqslant 3 ; 0 \leqslant j \leqslant 5$.

Domeniul Ω a fost împărţit de diviziunea π într-o familie de 15 dreptunghiuri Ω_{ij}, $1 \leqslant i \leqslant 3 ; 1 \leqslant j \leqslant 5$.

Valorile funcţiei $z = a_{Fe}$ în punctele P_{ij} sînt prezentate în tabelul 1.

Tabelul 1

Activitatea fierului în sistemul Cu_2S—FeS—Fe

$x = 1$		$x = 2$		$x = 3$		$x = 4$	
y	$z_{ij} = a_{Fe}$	y	$z_{ij} = a_{Fe}$	z	$z_{ij} = a_{Fe}$	y	$z_{jj} = a_{Fe}$
34	$z_{00} = 0,343$	34	$z_{10} = 0,382$	34	$z_{20} = 0,393$	34	$z_{30} = 0,432$
35	$z_{01} = 0,302$	35	$z_{11} = 0,363$	35	$z_{21} = 0,398$	35	$z_{31} = 0,440$
36	$z_{02} = 0,248$	36	$z_{12} = 0,341$	36	$z_{22} = 0,380$	36	$z_{32} = 0,437$
37	$z_{03} = 0,195$	37	$z_{13} = 0,305$	37	$z_{23} = 0,348$	37	$z_{33} = 0,413$
38	$z_{04} = 0,142$	38	$z_{14} = 0,250$	38	$z_{24} = 0,310$	38	$z_{34} = 0,376$
39	$z_{05} = 0,091$	39	$z_{15} = 0,213$	39	$z_{25} = 0,265$	39	$z_{35} = 0,319$

Cu ajutorul relaţiilor (31)— (42) s-a alcătuit un sistem de 48 ecuaţii cu 48 necunoscute (M_{ij}, N_{ij}; $0 \leqslant i \leqslant 3$; $0 \leqslant j \leqslant 5$), fiind necesară, în prealabil, determinarea valorilor derivatelor parţiale $z'_{ij(x)}$ şi $z'_{ij(y)}$ în punctele marginale ale diviziunii π. Aceste valori obţinute pe cale grafică sînt prezentate în tabelul 2, iar soluţiile sistemului în tabelele 3 şi 4.

Datele prezentate în tabelele 3 şi 4 permit obţinerea funcţiilor spline (22) şi (23).

Tabelul 2

Valorile derivatelor parţiale $z'_{ij(x)}$ şi $z'_{ij(y)}$ în punctele marginale ale diviziunii π

$z'_{00(x)} = 0{,}082$	$z'_{04(x)} = 0{,}366$	$z'_{30(x)} = 0{,}066$	$z'_{34(x)} = -0{,}077$
$z'_{01(x)} = 0{,}148$	$z'_{05(x)} = 0{,}458$	$z'_{31(x)} = 0{,}027$	$z'_{35(x)} = 0{,}058$
$z'_{02(x)} = 0{,}394$	$z'_{10(x)} = 0{,}016$	$z'_{32(x)} = -0{,}091$	$z'_{25(x)} = 0{,}053$
$z'_{03(x)} = 0{,}450$	$z'_{04(y)} = 0{,}017$	$z'_{20(x)} = 0{,}078$	$z'_{15(x)} = 0{,}048$
$z'_{00(y)} = -0{,}0335$	$z'_{04(y)} = -0{,}0520$	$z'_{30(y)} = -0{,}0200$	$z'_{34(y)} = -0{,}00430$
$z'_{01(y)} = -0{,}0400$	$z'_{04(y)} = -0{,}0485$	$z'_{31(y)} = -0{,}0022$	$z'_{35(y)} = -0{,}0670$
$z'_{02(y)} = -0{,}0535$	$z'_{10(y)} = -0{,}0175$	$z'_{32(y)} = -0{,}0150$	$z'_{25(y)} = -0{,}0450$
$z'_{03(y)} = -0{,}0530$	$z'_{20(y)} = 0{,}0125$	$z'_{33(y)} = -0{,}0320$	$z'_{15(y)} = -0{,}0275$

Tabelul 3

Valorile derivatelor parţiale de ordinul doi funcţie de x (M_{ij}) în punctele diviziunii π

	M_{ij}			
j \ i	0	1	2	3
0	−0,035534	−0,242482	0,186503	−0,012252
1	−0,083779	−0,354442	0,208802	−0,089401
2	−0,503520	−0,798960	0,290980	−0,043490
3	−0,055518	−1,928965	−0,040781	0,059391
4	−0,913936	0,279873	−0,098694	0,082347
5	−1,196000	0,376000	−0,185000	0,1045000

Tabelul 4

Valorile derivatelor parţiale de ordinul doi funcţie de y (N_{ij}) în punctele diviziunii π

	(N_{ij})			
j \ i	0	1	2	3
0	−0,032000	−0,012822	−0,004565	−0,046534
1	0,019000	0,016645	−0,035870	0,021067
2	−0,008000	−0,169725	−0,063384	0,071195
3	0,004000	0,203457	−0,563416	0,031820
4	0,001000	−0,295653	0,868126	−0,229429
5	0,007000	−0,120032	0,129350	−0,252957

4. Concluzii

— Funcția spline bicubică se dovedește deosebit de utilă în calculele termodinamice referitoare la activitatea componeților în sisteme ternare.

— Deoarece prin prelucrarea datelor experimentale se obține o funcție spline care aproximează de regulă, valorile activității unui singur component, valorile activității celorlalți doi componenți se pot obține analitic prin aplicarea relației Gibbs-Duhem.

În cazul sistemului studiat Cu_2S—FeS — Fe, care prezintă importanță în procesul de topire pentru mată din pirometalurgia cuprului, valorile maxime ale activității fierului, calculate cu ajutorul funcțiilor spline (22) sau (23), evidențiază acele compoziții de mată care trebuie obținute în practică pentru a conduce la pierderi minime de cupru în zgură.

BIBLIOGRAFIE

1. *Gh. Micula*, Funcții spline și aplicații, Ed. Tehnică, București, 1978.
2. *I. Fejes.*, Funcții spline în teoria mecanismelor, Ed. Științifică și enciclopedică, București, 1981
3. *D. Taloi*, Contribuții la studiul echilibrelor fazice și al proprietăților termodinamice ale matelor cuproase, teză de doctorat, București, 1974.

Use of Spline Functions in Thermodynamic Calculations Concerning to Thernary Systems

In the paper a new technique is presented for the calculation of components activity in ternary systems. The method is based on the use of two — variables bicubics spline functions.

The main equations are given for the construction of the two-variables spline function as well as their practical application to the study of ternary systems, with direct reference to the copper-iron-sulphur system.

C. Z.: 620.178.1 : 620.18

INFLUENȚA STRUCTURII ASUPRA COMPORTĂRII LA UZARE A MATERIALELOR METALICE

C. DUMITRESCU, GH. ALBIȚĂ, M. RĂDULESCU *

Uzarea la abraziune constituie un proces mecanic de degradare a suprafețelor pieselor aflate în contact cu corpuri sau particule mai dure.

Mult timp s-a considerat că unghiul de atac și duritatea sînt factori preponderenți, ulterior s-a admis și influența conținutului de carbon. Practica arată că acești factori nu sînt singurii care influențează uzarea la abraziune și rezistența la uzare.

Lucrarea prezintă sintetic aspectele importante ale acestei probleme care interesează proiectarea, exploatarea și întreținerea utilajului metalurgic, chimic etc.

Uzarea la abraziune constituie un proces mecanic de degradare a suprafețelor pieselor aflate în contact cu corpuri sau particule mai dure. Abraziunea poate avea loc atît prin microașchierea suprafeței de către părțile ascuțite ale rugozităților sau particulelor cît și prin deformarea plastică, în cazul în care muchiile acestora sînt rotunjite și sarcinile mari. În cazul oțelurilor, mult timp s-a considerat că unghiul de atac și duritatea sînt factori preponderenți; ulterior s-a admis și influența conținutului de carbon. Practica arată că acești factori nu sînt singurii care influențează uzarea la abraziune și rezistența la uzare [1].

Lucrarea prezintă sintetic aspectele importante ale acestei probleme care interesează proiectarea, exploatarea și întreținerea utilajului metalurgic, chimic etc.

Pînă în prezent este unanim acceptat că intensitatea uzurii de abraziune a unei suprafețe metalice se poate exprima printr-o relație simplificată de forma:

$$i_{abr.} = \frac{dV}{dl} = K_{abr.} \cdot \frac{F}{HV} \qquad (1)$$

unde: $\frac{dV}{dl}$ este uzura volumetrică raportată la unitatea de lungime de frecare; F — sarcina aplicată; HV — duritatea suprafeței mai moi; $K_{abr.}$ — coeficientul de uzură la abraziune care depinde de geometria asperităților sau de grăunții abrazivi.

* Conf. dr. ing., catedra Metalurgie fizică, Dr. ing.; Ing, I.C.P.U.P.S. București

Dacă o asperitate conică are unghiul θ şi $\overline{\cos}\ \theta$ este media ponderată pentru toate conurile de atac, atunci coeficientul de abraziune

$$K_{abr.} = \frac{2\,\overline{\cos\theta}}{\pi}$$

şi intensitatea uzurii devine :

$$i_{abr.} = \frac{dV}{dl} = \frac{2\,\overline{\cos\theta}}{\pi} \cdot \frac{F}{HV} \qquad (2)$$

Rezistenţa la uzură de abraziune se exprimă prin inversul intensităţii la uzură :

$$\varepsilon = \frac{dl}{dV} = \frac{\pi}{2\,\overline{\cos\theta}} \cdot \frac{HV}{F} \qquad (3)$$

deci ca o funcţie de duritate a materialului şi este pentru materialele metalice pure, în stare recoaptă, proporţională cu duritatea suprafeţelor.

Această lege — care nu este valabilă pentru materialele nemetalice cum sînt elastomerii şi materialele plastice — a fost verificată în condiţii de laborator pe metale pure şi oţeluri în stare recoaptă, supuse uzurii pe discuri abrazive cu granulaţie de 80 μm sau în cazul folosirii ca abraziv a particulelor de alumină cu granulaţie de 40 μm.

Liniaritatea expresiei $\varepsilon = f(HV)$ este verificată în condiţiile în care abrazivul este mai dur decît materialul metalic abrazat, ($H_{met}/H_{abr} = 0{,}5 - 0{,}6$) (fig. 1).

Cercetările experimentale au scos în evidenţă că între duritatea materialului metalic, duritatea abrazivului şi uzură există o strînsă legătură (fig. 2). Dacă abrazivul este mai moale decît materialul metalic

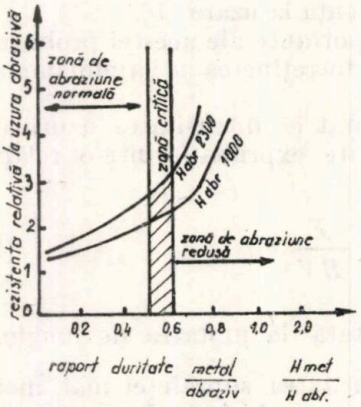


Fig. 1 — Relaţia rezistenţă relativă la uzura abrazivă — raport duritate metal/ duritate abraziv la oţelurile cu structură martensitică [2]

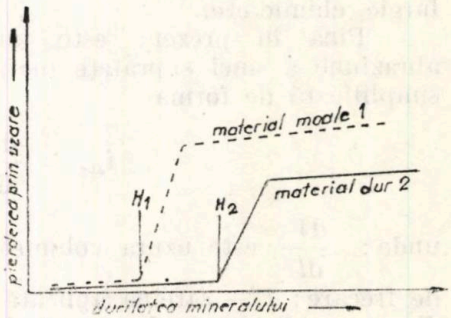


Fig. 2 — Dependenţa dintre pierderea la uzură, duritatea abrazivului şi duritatea a două materiale metalice [3, 4, 5]

uzura este redusă, iar dacă abrazivul este mai dur uzura este mai pronunţată.

În cadrul lucrărilor de specialitate este unanim acceptat că rezistenţa la uzură se îmbunătăţeşte odată cu creşterea durităţii materialului metalic, conform diagramei lui Hruşciov (fig. 3) şi îndeosebi în urma cercetărilor acestuia.

Din figura 3 rezultă că există un domeniu de creştere pronunţată a uzurii. Acest domeniu este redus în cazul materialelor metalice omogene şi mai larg la materialele metalice eterogene, datorită fazelor mai dure existente în structură.

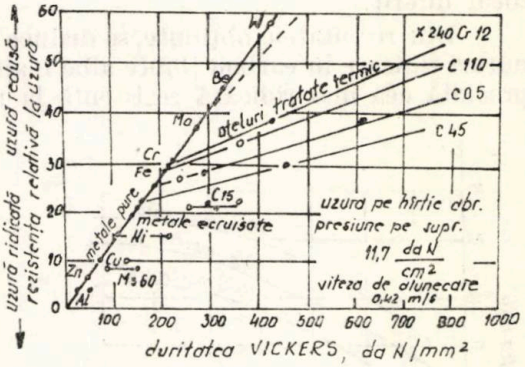


Fig. 3 — Dependenţa dintre rezistenţa la uzură de duritatea materialului metalic la uzura de alunecare pe grăunţi de corund [6]

Este de reţinut faptul că în multe determinări de laborator s-a observat o scădere importantă a uzurii odată cu creşterea durităţii abrazivului, scădere care a fost pusă pe seama metodei de determinare a uzurii (în general uzura se determină pe discuri abrazive) [8], explicaţie cel puţin incompletă.

Din relaţiile (2) şi (3) rezultă de asemenea că modificarea lui θ este şi ea importantă; dacă muchiile particulelor abrazive se rotunjesc rezistenţa la uzura abrazivă creşte mult fapt ce a fost demonstrat experimental.

Din cele prezentate precum şi în cadrul relaţiei (3) starea de prelucrare cît şi morfologia şi gradul de fineţe a constituenţilor structurali ai materialului metalic supus abrazării nu intervin în nici un fel, ca şi cum influenţa în procesul de uzare este constantă.

De altfel, însuşi procesul de uzare prin abraziune poate decurge prin mai multe mecanisme: microaşchierea rizare prin deformare, eroziune abrazivă, brăzdare şi zgîriere.

În cazul aliajelor Fe—C, la aceeaşi compoziţie chimică, poate exista o largă varietate de constituenţi structurali. De exemplu, constituenţii de tip perlitic pot fi sub formă de perlită lamelară, perlită sorbitică, troostită şi perlită globulară, funcţie de valoarea vitezei şi modul de răcire după încălzirea în domeniul austenitic. La aceeaşi duritate, pot exista mai multe tipuri de structuri, comportamentul la uzură fiind diferit de la caz la caz; perlita lamelară se comportă mai favorabil în procesul de uzură decît perlita globulară sau decît troostita. De asemenea, la călire, structura poate fi alcătuită din martensită (aciculară sau criptocristalină) sau alcătuită din martensită şi austenită reziduală, în funcţie de conţinutul de carbon al oţelului (fig. 4), fapt care influenţează direct duritatea materialului metalic. Pe de altă parte, rezultă că rezistenţa la uzură este dată, deci, de morfologia martensitei şi de conţinutul în carbon.

La aceeaşi compoziţie chimică şi duritate, perlita prezintă o rezistenţă la uzură mai ridicată decît martensita supusă în prealabil revenirii. De

asemenea, o martensită bogată în carbon, supusă revenirii, poate fi sărăcită în carbon datorită precipitărilor carburilor, cu toate că valorile microdurităţii sînt ridicate. De multe ori, pentru creşterea rezistenţei la şoc (tenacităţii), martensita trebuie supusă revenirilor înalte, comportamentul constituenţilor structurali obţinuţi (sorbită, perlită globulară), fiind cu totul diferit.

Din rezultatele obţinute, se deduce că materialele metalice cu conţinuturi ridicate în carbon (fonte albe înalt aliate) în cele mai multe cazuri prezintă cea mai ridicată rezistenţă la uzură abrazivă.

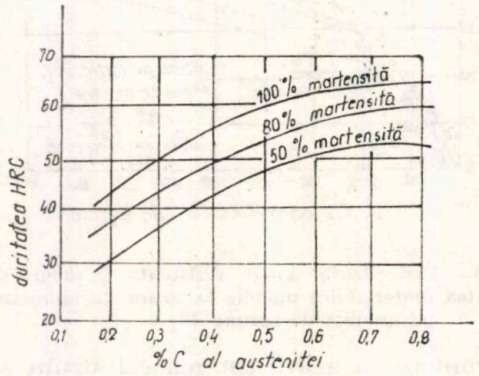


Fig. 4. — Duritatea oţelurilor carbon în funcţie de conţinutul de carbon şi proporţia de martensită în structură

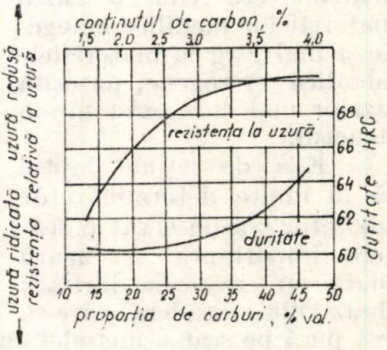


Fig. 5 — Dependenţa dintre proporţia de carburi (respectiv conţinutul în carbon), duritate şi rezistenţă la uzură a a unei fonte albe cu masa de bază martensitică cu 12—14% Cr.; 1,4—1,8% Mo; 0,5—0,0% Mn; 0,3—0,8% Si

O influenţă importantă asupra comportamentului la uzură, a fontelor albe, înalt aliate, la aceleaşi valori ridicate ale durităţii, o are proporţia de carburi.

Fig. 5 prezintă dependenţa obţinută, după metoda uzurii, la o fontă albă înalt aliată cu crom, cu structura alcătuită din carburi primare şi eutectic plasate în masa metalică de bază martensitică; proporţia de carburi este dependentă de conţinutul în carbon. Rezistenţa la uzură creşte energic cu proporţia de carbon pînă la 3%C după care, creşterea este monotonă. Acestea se explică prin aceea că la conţinuturi mari de carbon, datorită conţinuturilor de crom (12—14%) în structură pot apare carburi primare, fonta devenind hipereutectică. Pe de o parte cementita prezintă o duritate mai mică, iar pe de altă parte cristalele primare de carburi sînt mai grosolane, acestea influenţînd negativ comportarea la uzură.

Aceeaşi influenţă a carbonului şi cromului asupra rezistenţei la uzură a fost evidenţiată şi la fontele cu masă de bază perlitică şi cu masă de bază austenitică.

În tabelul 1 se prezintă, comparativ, comportarea la solicitarea de uzură a mai multor tipuri de fonte utilizate la executarea unor transportoare în spirală.

Tabelul 1

Nr. crt	Materialul	Conţinutul de carbon, %	Duritate HRC	Uzura relativă
1	Fontă albă aliată. 15% Cr + 3% Mo.	3,3	58	78
2	Fontă aliată 27% Cr.	3,1	57	48
3	Fontă albă martensitică. 4% Ni + 2% Cr.	3,3	57	80
4	Fontă albă aliată perlitică, 1% Cf.	3,3	47	100
5	Oţel martensitic, Cr—Mo.	1,5	57	180

Aliajele 1,2 şi 3 au, practic, aceeaşi duritate, aceeaşi masă metalică de bază şi conţinuturi de carbon apropiate; aliajele 1 şi 2 prezintă însă un comportament, la uzură, superior aliajului 3 cu conţinut redus de crom. Diferenţa între aliajul 1 şi 2, în ceea ce priveşte valoarea uzurii, se datorează în special conţinutului mai redus de carbon al aliajului 2 şi, deci, a microdurităţii. Aliajul 5 (oţel martensitic crom-molibden) cu toate că are duritate comparabilă cu aliajele 1,2 şi 3, prezintă totuşi o rezistenţă mai coborîtă la uzură decît acestea şi chiar mai mică decît cea a aliajului 4, care are o duritate mai scăzută (masă de bază perlitică).

Un rol important asupra comportamentului la uzură îl prezintă şi eutecticul (fig. 6); cu cît gradul de fineţe şi dispersie este mai mare, cu atît rezistenţa la solicitările de uzură abrazivă este mai ridicată.

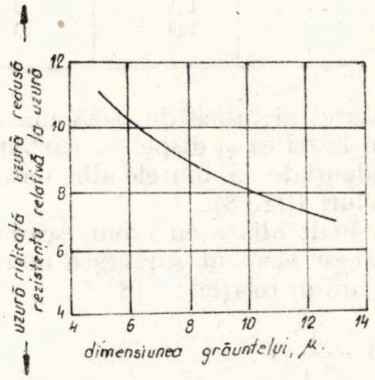


Fig. 6 — Influenţa dimensiunii grăuntelui asupra rezistenţei la uzură a unei fonte albe înalt aliate cu structură martensitică (12—14% Cr; 1,4—1,8% Mo; 3% C). Uzură abrazivă

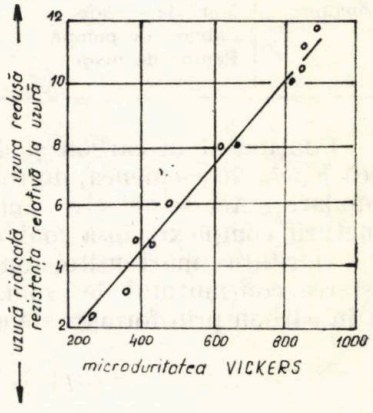


Fig. 7 — Influenţa microdurităţii masei metalice de bază asupra rezistenţei la uzură a unei fonte albe cu 3% C; 13% Cr; 15% Mo; Uzură abrazivă

În figura 6 se arată că odată cu creșterea grăuntelui rezistența la uzură scade. Mărimea de grăunte este influențată de dimensiunile pieselor, respectiv de viteza de răcire la solidificare. Piesele turnate în cochilii prezintă rezistențe la uzură superioare celor turnate în amestec de formare.

Masa metalică de bază, respectiv tipul și aspectul ei, este un alt factor ce influențează rezistența la uzură a materialelor metalice; ea poate fi austenitică, perlitică sau preponderent martensitică. Pînă în prezent nu se cunosc fonte albe cu masa metalică de bază bainitică, deși s-au elaborat fonte cenușii cu astfel de structuri și cu proprietăți superioare.

Influența microdurității masei metalice de bază asupra rezistenței la uzură a unei fonte albe înalt aliate este prezentată în fig. 7. Masele metalice de bază cu durități mai reduse sînt fie perlitice, fie austenitice; cele cu durități mai mari sînt martensitice.

În tabelul 2 se prezintă unele date, de interes practic, privind comportarea în exploatare a unor piese.

Tabelul 2

Rezultatele comportării la uzură a unor fonte albe cu structură martensitică (4% Ni; 2%Cr) și perlitică (nealiată)

Tipul uzurii	Utilizare	Anduranță relativă	
		F.a. martens.	F.a. perlitică
Uzură prin crestare	Valțuri de măcinat min. de Pb, Zb	3,8	1
	Ciocane ptr. minereuri de Cu	2,2	1
	Ciocane ptr. mori de cocs	2,5	1
	Blindaje pentru mori cu valțuri	3,3	1
Uzură de măcinare	Bile de măcinat — fier	1,8—2	1
	minereuri de: — cupru	1,5	1
	— molibden	1,3—2	1
	— hematită	2,4	1
	Blindaje ptr. mori de minereu	5,5	1
Eroziune	Mori de sortare	1,3	1
	Carcase de pompe	1,9	1
	Pompe de nisip	1,1	1

Conținutul în carbon și duritatea masei metalice de bază martensitică joacă, de asemenea, un rol important la fel ca și dispersia carburilor secundare. Aceste efecte sînt greu evidențiate la fontele albe datorită structurii complexe, însă mai ușor la oțeluri (fig. 8).

Duritatea martensitei fontelor albe, înalt aliate cu crom, scade cu creșterea conținutului de crom, întrucît acest element sărăcește martensita în carbon prin formare de carburi, conform relației: [8]

$$HV = 1035 - 33\,\frac{\%Cr}{\%C}, \qquad (4)$$

Această relație este valabilă pentru piese groase; la piesele subțiri, ca urmare a îndepărtării de echilibru la răcire, este posibil ca martensita să fie mai bogată în carbon.

Adaosurile de vanadiu la o fontă cu 15% Cr și 3% Mo au o acțiune similară cu cromul. O fontă cu 1,5 %V și 1,5% Mo prezintă o rezistență la uzură cu 30% mai mică decît fonta aliată cu 3%Mo. Vanadiul formînd carburi, scoate carbonul din masa metalică de bază astfel încît martensita

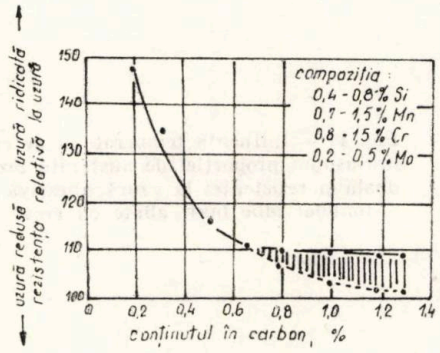


Fig. 8 — Pierderea relativă la uzare în funcție de conținutul în carbon la oțelurile martensitice, determinată pe bile la măcinarea minereului de molibden

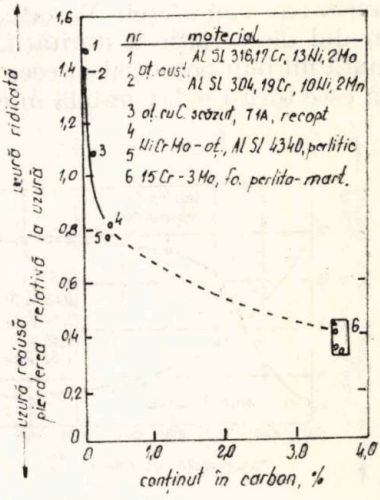


Fig. 9 — Dependența dintre pierdere la uzură, conținutul de carbon și tipul masei metalice de bază la diverse aliaje cu bază de fier [9]

devine mai moale, fără ca, în ansamblu, duritatea fontei să varieze remarcabil.

De asemenea, structurile mixte, perlito-martensitice, imprimă o rezistență la uzură mai scăzută (fig. 9 poz. 6).

Acest efect este deosebit de nefavorabil la fontele albe în cazul în care călirea nu s-a făcut suficient de energic, pentru a asigura obținerea, în structură, numai a martensitei. Un astfel de caz este prezentat în fig. 10,

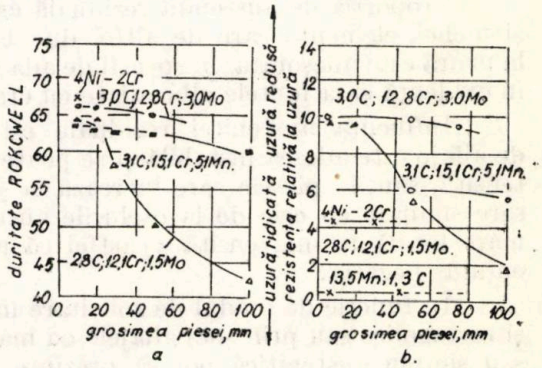


Fig. 10 — Duritatea și rezistența la uzură în funcție de grosimea pieselor turnate din diverse aliaje (fonte albe înalt aliate și oțel aliat manganos)

care arată influenţa grosimii piesei (deci a vitezei de răcire) asupra durităţii şi rezistenţei la uzură.

Aliajele cu 12%Cr + 3%Mo şi 15% Cr + 5%Mn prezintă o bună călibilitate (fig. 10 a). Aliajul cu 12%Cr + 1,5% Mo dimpotrivă, prezintă o călibilitate mai slabă, fapt pentru care în centrul pieselor nu se asigură duritatea suprafeţei. Variaţia rezistenţei la uzură (fig. 10, b) urmăreşte modul de variaţie a durităţii. Deşi aliajul cu 12%Cr + 1,5% Mo prezintă un bun potenţial în ceea ce priveşte rezistenţa la uzură, comportarea sa este totuşi nefavorabilă în comparaţie cu fontele albe ledeburitice.

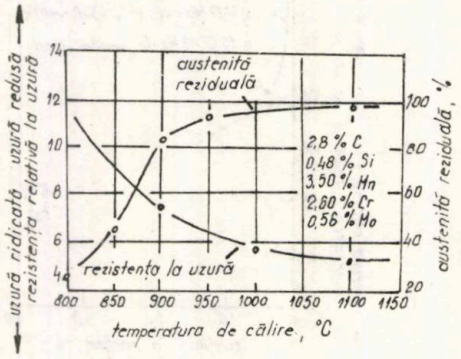


Fig. 11 — Influenţa temperaturii de călire asupra proporţiei de austenită reziduală şi rezistenţei la uzură abrazivă a fontelor albe înalt aliate cu crom

Oţelul manganos (13,5% Mn + 1,3%C) prezintă cel mai nefavorabil comportament la uzură, întrucît metoda de încercare a constat într-o simplă uzură abrazivă (fără şocuri).

Compararea datelor din diagramele 10 a şi 10 b arată clar că între comportarea la uzură şi duritate, la materialele metalice cu structuri atît de diferite, nu există nici o legătură.

Fontele albe înalt aliate prezintă în structură, după călire o cantitate relativ mare de austenită reziduală, care poate fi influenţată greu prin revenire dacă apucă să se stabilizeze. Conţinutul de austenită reziduală creşte cu creşterea temperaturii de călire datorită îmbogăţirii masei metalice de bază cu carbon şi elemente de aliere (fig. 11). Aceasta se manifestă prin scăderea rezistenţei la uzură.

Proporţia de austenită reziduală creşte la adaosuri de mangan, cupru şi nichel, elemente care de altfel duc la mărirea călibilităţii. Rezistenţa la uzură este micşorată în special de adaosurile de mangan, dar a fost pusă în evidenţă şi la fontele albe aliate cu crom şi nichel.

Influenţa austenitei reziduale este negativă, austenita din astfel de aliaje este adesea instabilă şi se poate transforma în exploatare în martensită, sau, la piesele care lucrează la şoc, poate suferi procese de ecruisare similare cu cele de la oţelurile austenitice manganoase (cu transformare locală în martensită ε) astfel că rezistenţa la uzură nu este influenţată negativ.

În funcţie de modul de solicitare în exploatare (uzură prin alunecare şi rostogolire sau prin şoc) aliajele cu masă de bază austenito-martensitică sau simplu austenitică pot să prezinte un comportament diferit. Pentru

piesele supuse în exploatare la uzură prin șoc, proporția de austenită reziduală este deosebit de importantă, întrucît la aliajele austenito-martensitice, la valori mai ridicate de 5—7% favorizează apariția uzurii la oboseală.

În tabelul 3 sînt prezentate unele date de laborator privitoare la această problemă.

Tabelul 3

Rezistența la uzură prin eroziune și crestătură a unor fonte albe cu masa de bază austenitică și martensitică

Tipul uzurii	Materialul	Tratament termic	Structura masei de bază*)	Duritatea H.R.C.	Capacitate relativă de uzură
Eroziune de nisip	12 %Cr ; 1,9 %40 3 ,2 %C.	Turnat.	A + (P)	49	2 ,42
		1050°C/aer.	M + A	60	5 ,12
	18 %Cr ; 2 ,3 %C	Turnat.	A + (P	46	1 ,80
		1050°C/aer.	M + A	60	5 ,32
	16 %Cr : 0 ,6 %Mo 3 %C,	Turnat.	A + (P)	50	2 ,25
		1,50°C/aer.	M + A	62	6 ,03
	2,8 %Cr ; 3,3 %C.	Turnat.	A	53	5 ,69
		1100°C/aer.	M + A	58	6 ,95
	16 %Cr : 1 ,9 %40 3 ,1 %C.	Turnat.	A + (P)	54	3 ,59
		1050°C/aer.	M + A	62	7 ,77
Uzură prin crestătură concasor de laborator	27 %Cr ; 2 ,6 %C.	Turnat	A	94 ,7—57 ,3**	59
		010°C/aer + 230°C	N + A	60	74
	20 %Cr ; 2 %40 1 %Cu : 2,9 %C.	Turnat.	A	50 ,2—58 ,8**	92
		960°C/aer+ 200°C	M + (B)+ A	64	129
	15 %Cr ; 2 %Mo 1 %Cu ; 3 ,3C.	Turnat.	A	49 ,7—57 ,3**	107
		960°C/aer + 200°C	M + (B) +	63	139

*) A = austenită ; (A) = proporție redusă de austenită ;
M = martensită ; (P) = proporție redusă de perlită ;
(B) = proporție redusă de bainită.
**) Durități la suprafață înainte și după exploatare.

Aceste aliaje prezintă în stare turnată structură austenitică (total sau parțial) iar după călire structură martensitică cu austenită reziduală.

Rezultatele arată că fontele albe înalt aliate se comportă superior atît la uzura prin eroziune cît și la uzura prin crestătură.

În condiţiile de uzare prin crestătură se înregistrează diferenţe mici în ceea ce priveşte comportamentul la uzură a fontelor cu masă de bază austenitică şi masă de bază martensitică, aceasta, probabil, pe baza ecruisării austenitei.

Comportamentul fontelor este dependent de modul de solicitare în exploatare (tipul uzurii), fiind unanim recunoscut că structura martensitică a masei metalice de bază asigură o rezistenţă superioară la uzură în toate condiţiile de solicitare.

În concluzie aprecierea la uzare pentru proiectant şi utilizator nu poate fi simplificată la duritatea materialului, acţiunea abrazivului sau la conţinutul de carbon. [8].

Comportarea la uzare este mult mai complexă. Avînd în vedere deosebirile importante în ceea ce priveşte morfologia şi gradul de fineţe şi dispersie a constituenţilor structurali, este greu de admis că, rezistenţa la uzură abrazivă poate fi exprimată, în mod riguros printr-o relaţie de dependenţă liniară de forma $\varepsilon = f(HV)$. Acestea trebuie puse în legătură cu procesele ce au loc în exploatare. Este necesar să fie efectuate experimentări prealabile în condiţii cît mai apropiate de realitate.

BIBLIOGRAFIE

1. *D. Pavelescu*, Tribotehnica, Ed. Tehnică, 1983, Bucureşti
2. *I. Ayel*, Les differentes formes tribologiques d'usure des surfaces métalliques, ,,Lubrifiant moteur", Paris, Ed. Techniq, 1979, p. 92—147
3. *K. Sellonger, H. Uetz*, V In Forsch — H 449, 1955
4. *K., Wellinger, H., Uetz*, Aufbereitungstech 4(1963), p. 319/35.
5. *H. Wahl*, Arch. Metallkunde, 1949, p. 121/28.
6. *M. M. Hrusciov*, Proc. Conf. on Lubricätion and Wear, London, oct. 1957
7. *L. Bungardt*, Arch. Eisenhuttenwes 29(1958), p. 193
   Kunze,
   K. Röhring, Giesserei 58 (1971), nr. 23, p. 697.
   R. D. Hawort, Trans. A.S.M. 41 (1949) p. 819/69.

The Influence of Structure on the Metals Wear

The abrasive wear is a mechanical process of degrading of the surfaces of the parts which contact hard bodies of particles.

For a long time, they have considered that the angle of attack and the hardness are important factors, but they also admitted the influence of the carbon contact. The common practice shows that these factors are not the only ones to influence the abrasive wear and the wear resistance.

This paper presents sinthetically the main aspects of this problem which is very important for the design, running and maintenance of the metallurgical chemical equipments etc.

C. Z.: 621.785

STUDII ŞI CERCETĂRI EXPERIMENTALE PRIVIND TRATAMENTUL TERMIC AL OŢELURILOR DE ÎNALTĂ REZISTENŢĂ SLAB ALIATE ŞI MICROALIATE CU BOR

I. DRĂGAN, MIHAELA ISAC*

În această lucrare sînt prezentate rezultatele experimentale şi interpretarea acestora, privind compoziţia chimică şi tratamentele termice aplicate oţelului slab aliat şi microaliat cu bor.

Clasa oţelurilor de construcţie, sudabile, cu rezistenţă ridicată, slab aliate şi microaliate, a cunoscut în ultimii ani o dezvoltare puternică şi datorită răspîndirii oţelurilor utilizate în stare călită şi revenită.

Limite de curgere superioare valorilor de 500 N/mm^2, pot fi obţinute aplicînd tratamente termice de călire şi revenire oţelurilor cu compoziţiile chimice prezentate mai jos.

Cercetările experimentale au fost orientate în direcţia stabilirii influenţei parametrilor termici şi temporali asupra caracteristicilor mecanice

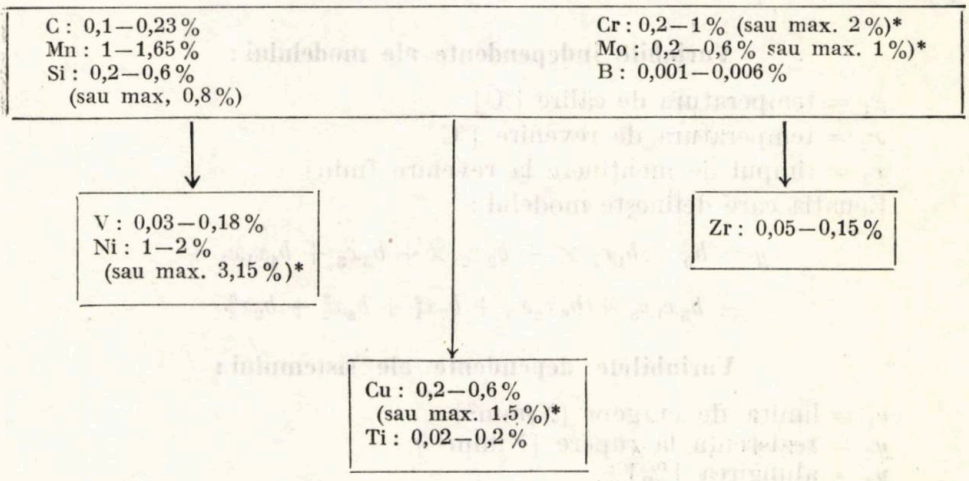


Fig. 1 — Compoziţii chimice tipice pentru oţeluri de înaltă rezistenţă slab aliate şi microaliate destinate fabricaţiei produselor plate utilizate în stare călită şi revenită.

* Conf. dr. ing., I.C.E.M., Bucureşti; Asist. dr. ing., catedra Metalurgie fizică

obținute după călirea și revenirea oțelului, microaliat cu B cu compoziția prezentată în tabelul 1.

Tabelul 1

Marca oțelului	Analiza comp. chimice	Compoziția chimică [%] — lingou de 50 kg elaborat într-un cuptor cu încălzire prin inducție									
		C	Mn	Si	S	P	Cr	Mo	B	Al	Ni
C—Mn—Cr—Mo—B	L	0,2	1,00	0,37	0,013	0,017	0,9	0,43	0,0046	0,008	—
	P_1	0,2	1,00	0,35	0,019	0'018	0,89	0,41	0,008	0,006	0,04
	P_2	0,2	0,99	0,34	0,018	0,017	0,89	0,43	0,0083	0,004	0,04

L — analiza compoziției pe oțel lichid
P_1, P_2 — analiza compoziției chimice la capul și piciorul lingoului.

Tratamentele termice de călire cu răcire în apă și revenire au fost efectuate în cuptoare de laborator pe probe cu dimensiuni corespunzătoare prelucrării ulterioare a epruvetelor pentru încercări mecanice.

Pentru determinarea corectă a gradului de influență manifestat de parametrii tehnologici ai proceselor de călire și revenire asupra caracteristicilor mecanice și structurale ale oțelului a fost aplicată o metodă matematică de planificare a experimentărilor și anume metoda de programare central compozițional rotabilă de ordinul II.

Variabilele independente ale proceselor și deci ale modelului matematic adopat, ecuația care definește modelul precum și variabilele dependente sînt prezentate în cele ce urmează.

Variabile independente ale modelului:

x_1 = temperatura de călire [°C]
x_2 = temperatura de revenire [°C]
x_3 = timpul de menținere la revenire [min]
Ecuația care definește modelul:

$$y = b_0 + b_1x_1 \times + b_2x_2 \times + b_3x_3 + b_4x_1x_2 +$$

$$+ b_5x_1x_3 + b_6x_2x_3 + b_7x_1^2 + b_8x_2^2 + b_9x_3^2$$

Variabilele dependente ale sistemului:

y_1 = limita de curgere [N/mm²]
y_2 = rezistența la rupere [N/mm²]
y_3 = alungirea [%]
y_4 = strictiunea [%]
y_5 = energia de rupere prin șoc, longitudinal, [J]
y_6 = energia de rupere prin șoc, transversal, [J]
y_7 = duritatea după îmbunătățire [HV]

Numărul total de regimuri complete de călire și revenire necesare pentru determinarea modelului este 20 dintre care 6 regimuri practicate cu parametri tehnologici identici, deci în centrul modelului.

Codificarea variabilelor independente, nivele de bază și nivelele de variație sînt prezentate în tabelul 2.

Tabelul 2

Variabila	Valori codificate Δx_i	$-1,682$	-1	0	$+1$	$+1,682$
0	1	1	1	1	1	1
1	20°	886	900	920	940	954
2	40°	573	600	640	680	707
3	30 min	40	60	90	120	140

(— 1, + 1, ±1,682 reprezintă nivelele de variație a fiecărei variabile independente.
x_i — reprezintă pasul cu care se face varierea).

Matricea completă a regimurilor practicate în valori codificate este prezentată în tabelul 3.

Regimurile complete de tratamente termice experimentale sînt prezentate în tabelul 4, iar rezultatele deci valorile parametrilor dependenți efectiv obținute în urma experimentărilor sînt prezentate în tabelul 5.

Calcularea formei particulare a ecuației neliniare a modelului matematic pentru fiecare variabilă dependentă a presupus parcurgerea etapelor :

a. calcularea coeficienților ecuației prin metoda celor mai mici pătrate precum și calcularea dispersiilor în determinarea coeficienților;

b. calculul nivelelor de încredere ale coeficienților ecuației.

Verificarea statistică a modelului cuprinde :

1. Determinarea dispersiei în centrul modelului sau dispersia reproductibilității rezultatelor;

2. Verificarea statistică a coeficienților punîndu-se condiția ca valoarea absolută a coeficientului să fie superioară nivelului de încredere al acestui coeficient (utilizîndu-se în acest scop și criteriul student) :

3. Verificarea concordanței modelului cu ajutorul criteriului Fischer și respectiv a dispersiei provocate de ecuația de regresie.

Modelul calculat este concordant atunci cînd :

$$\text{Crit. Fischer}_{\text{calculat}} < F_{\text{tabelat}}$$

Similar au fost efectuate calculele pentru toate variabilele dependente ale modulului.

În cele ce urmează sînt prezentate ecuațiile modelului pentru variabilele dependente studiate.

Tabelul 3

Programare central — compoziţional — rotabila de ordinul doi (PCCR)

Total experienţe = 20
Total experienţe în centru = 6
Total coeficienţi = 10

MATRICEA X iniţială

Nr. exp.	×1	×2	×3	×4	×5	×6	×7	×8	×9	×10
1.	1,0	−1	−1	−1	1	1	1	1	1	1
2.	1	1	1	−1	−1	−1	1	1	1	1
3.	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1	1	1
4.	1	1	1	−1	1	−1	−1	1	1	1
5.	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1	1	1
6.	1	1	−1	1	−1	1	−1	1	1	1
7.	1	−1	1	1	−1	−1	1	1	1	1
8.	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
9.	1	1,682	0	0	0	0	0	2,829	0	0
10.	1	−1,682	0	0	0	0	0	2,829	0	0
11.	1	0	1,682	0	0	0	0	0	2,829	0
12.	1	0	−1,682	0	0	0	0	0	2,829	0
13.	1	0	0	1,682	0	0	0	0	0	2,829
14.	1	0	0	−1,682	0	0	0	0	0	2,829
15.	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16.	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17.	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18.	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19.	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20.	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabelul 4

Regimuri de tratamente termice experimentate

Nr. exp.	x_1 Temp. călire °C	x_2 Temp. revenire °C	x_3 Timp menținere rev. min.
1.	900	600	60
2.	940	600	60
3.	900	680	60
4.	940	680	60
5.	900	600	120
6.	940	600	120
7.	900	680	120
8.	940	680	120
9.	954	640	90
10.	886	640	90
11.	920	707	90
12.	920	573	90
13.	920	640	140
14.	920	640	40
15.	920	640	90
16.	920	640	90
17.	920	640	90
18.	920	640	90
19.	920	640	90
20.	920	640	90

Tabelul 5

Valorile caracteristicilor mecanice măsurate
OTEL : C—Mn—Cr—Mo—B

Nr. exp.	y_1 R_{p02} N/mm²	y_2 R_m N/mm²	y_3 A_5 %	y_4 Z %	y_5 KV_L J	y_6 KV_T J	y_7 HV
1.	810	909	17,1	67,5	78,0	30	279
2.	825	909	16,0	68,5	96,0	30	285
3.	584	714	20,0	71,6	110,00	40	221
4.	597	701	16,3	67,5	93	36	240
5.	804	896	17,1	67,5	74	30	315
6.	822	909	16,0	67,5	88	30	285
7.	597	701	20,0	67,5	114	39	218
8.	571	675	21,4	70,6	100	36	217
9.	695	792	18,0	68,1	94	30	248
10.	665	756	16,1	69,3	110	30	265
11.	547	701	21,4	69,0	125	32	216
12.	885	948	18,2	63,2	80	25	271
13.	633	740	17,1	72,1	114	40	260
14.	649	766	20,0	67,5	87	39	255
15.	638	740	16,0	70,6	101	29	240
16.	649	761	18,5	69,0	96	28	245
17.	623	727	16,7	70,6	104	29	262
18.	647	727	18,1	68,9	110	30	259
19.	625	723	16,0	68,0	93	28	248
20.	651	752	18,8	69,0	113	31	261

Ecuațiile variabilelor dependente maximele și minimele

OTEL : C—Mn—Cr—Mo—B

$y_1 = R_{p02}$, limita de curgere, [N/m²]

$y_1 = 638{,}091 - 108397\ x_2 + 18{,}784\ x_1^2 + 31{,}523\ x_2^2$

R_{p02}, min = 547 N/mm² (Tc = 919°C, Trev = 698°C, trev =40 min)

R_{p02}, max = 962 N/mm² (Tc = 886°C, Trev = 573°C, trev = 40 min)

$y_2 = R_m$, rezistenţa la rupere [N/mm²]

$y_2 = 737{,}718 - 91{,}333\, x_2 + 15{,}437\, x_1^2 + 33{,}838\, x_2^2 + 8{,}536\, x_3^2$

R_m, min = 676 N/mm² (Tc = 919°C, Trev = 698°C, trev = 90 min)

R_m, min = 1053 N/mm²(Tc = 886°C, Trev = 573°C, trev = 40 min)

$y_3 = A_5$, alungirea, [%]

$y_3 = 16{,}349 + 1{,}236x_2 + 1{,}099x_2^2$

A_5, min = 16% (Tc = 886°C, Trev = 617°C, trev = 40 min)

A_5, max = 21,5% (Tc = 886°C, Trev = 707°C, trev = 40 min)

$y_4 = Z$, strictiune, [%]

$y_4 = 69{,}339 + 1{,}168x_2 + 0{,}775x_1x_3 - 1{,}076x_2^2$

Z, min = 61 % (Tc = 960°C, Trev = 573°C, trev = 40 min)

Z, max = 72%(Tc = 960°C, Trev = 662°C, trev = 140 min)

$y_5 = KV_L$, energia de rupere prin şoc pe direcţia longitudinală [J]

$y_5 = 103{,}084 + 11{,}472x_2 - 7{,}880x_1x_2$

KV_L, min = 61 J (Tc = 886°C, Trev = 573°C, trev = 40 min)

KV_L, max = 144 J (Tc = 886°C, Trev = 707°C, trev = 40 min)

$y_6 = KV_T$, energia de rupere prin şoc pe direcţia transversală) [J]

$y_6 = 29{,}126 + 3{,}131x_2 - 0{,}875x_1x_2 + 3{,}869x_3$

KV_T, min = 21 J(Tc = 886°C, Trev = 573°C, trev = 90 min)

KV_T, max = 46,5 J (Tc = 886°C, Trev = 698°C, trev = 40 min)

$y_7 = HV$-, duritatea după călire şi revenire

$y_7 = 252{,}333 - 26{,}395x_2 - 7{,}004x_1x_3 - 7{,}754x_2x_3$

HV, min = 181 (Tc = 953°C, Tc = 698°C. trev = 131 min)

HV, max = 331 (Tc = 886°C, Tc = 573°C, trev = 131 min)

Semnul și valoarea coeficienților ecuațiilor dau indicații legate de gradul de influență pe care îl manifestă variabilele independente, singure sau în combinație, asupra parametrilor dependenți

Și anume :

Din analiza ecuației pentru limita de curgere se constată că aceasta este influențată în principal de temperatura de revenire (cu creșterea acesteia scade limita de curgere) și mai slab de temperatura de călire.

Rezistența la rupere este determinată în ordinea descrescătoare a influenței de către temperatura de revenire care se detașează net față de

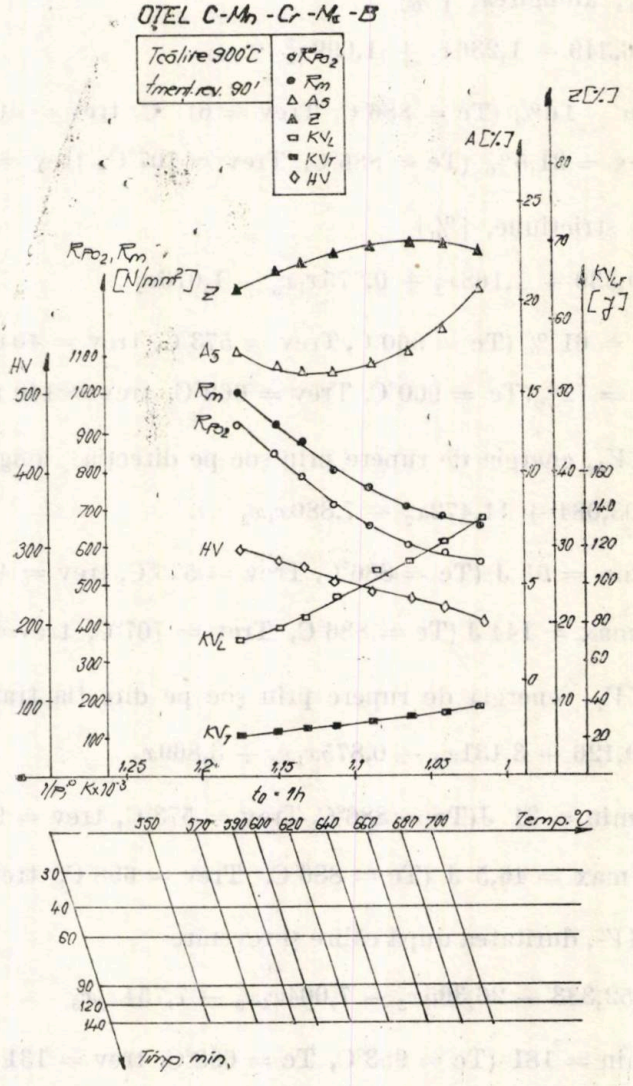


Fig. 2 — Variația caracteristicilor mecanice cu parametrul revenirii

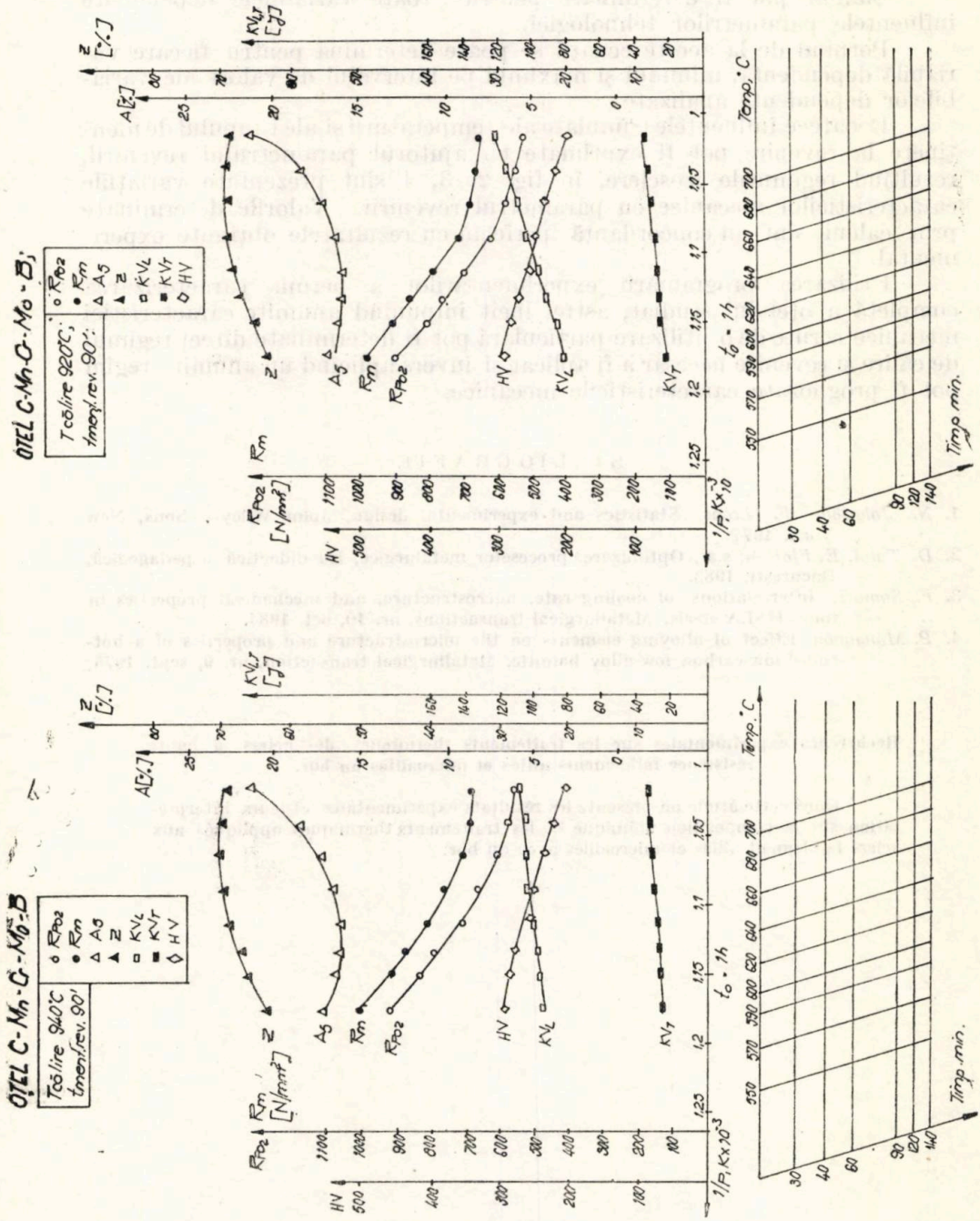


Fig. 3, 4 — Variaţia caracteristicilor mecanice cu parametrul revenirii.

celelalte influenţe, ca magnitudine, urmată apoi de temperatura de călire şi apoi de către timpul de menţinere la revenire.

Similar pot fi determinate pentru toate variabilele dependente influenţele parametrilor tehnologici.

Pornind de la aceste ecuaţii se poate determina pentru fiecare variabilă dependentă, minimul şi maximul pe intervalul de valori ale variabilelor dependente analizate.

Deoarece influenţele cumulate ale temperaturii şi ale timpului de menţinere la revenire pot fi exprimate cu ajutorul parametrului revenirii, rezultînd regimurile izosclere, în fig. 2, 3, 4 sînt prezentate variaţiile caracteristicilor mecanice cu parametrul revenirii. Valorile determinate prin calcul sînt în concordanţă perfectă cu rezultatele obţinute experimental.

Utilizarea programării experimentărilor a permis caracterizarea completă a oţelului studiat, astfel încît impunînd anumite caracteristici mecanice cerute de o utilizare particulară pot fi determinate direct regimul de călire şi revenire necesar a fi aplicat şi invers aplicînd un anumit regim pot fi prognozate caracteristicile mecanice.

BIBLIOGRAFIE

1. *N. Johnson, F. Leone*, Statistics and experimental design, John Wiley — Sons, New York, 1977.
2. *D. Taloi, E. Florian*, ş.a., Optimizarea proceselor metalurgice, Ed. didactică şi pedagogică, Bucureşti, 1983.
3. *F. Samuel*, Interrelations of cooling rate, microstructure, and mechanical properties in four HSLA steels, Metallurgical transactions, nr. 10, oct. 1984.
4. *P. Manganon*, Effect of alloying elements on the microstructure and properties of a hot-rolled low-carbon low-alloy bainitic, Metallurgical transaction, nr. 9, sept. 1976.

Recherches expérimentales sur les traitements thermiques des aciers à haute résistence faiblements alliés et microalliés au bor.

Dans cette étude on présente les résultats expérimentaux et leurs interprétation sur la composition chimique et les traitements thermiques appliqués aux aciers faiblement alliés et microalliés avec du bor.

C. Z.: 621.744.33

ECHILIBRUL DINAMIC AL DORNULUI FLOTANT LA TRAGEREA ȚEVILOR

N. ATANASIU*

În lucrare se descriu principiile de optimizare a focarului de deformare la tragerea țevilor pe dorn flotant.

În acest scop s-au determinat relațiile de calcul și s-a elaborat un program Fortran pentru calculatorul Felix C—256.

1. Introducere

La tragerea țevilor din oțel și din metale și aliaje neferoase se aplică în practica industrială două procedee larg răspîndite;

a) tragerea liberă fără suport interior;

b) tragerea cu dorn fix sau dorn mobil.

Relativ recent s-a introdus procedeul de tragere cu dorn flotant destinat fabricării, în special a țevilor cu diametre mici și pereți subțiri și de lungimi mari.

Procedeul de tragere a țevilor cu dorn flotant cunoaște o extindere și diversificare datorită unui complex de avantaje, dintre care se menționează: viteze de tragere ridicate, de pînă la 700 m/min reducerea consumului specific de metal, suprafețe curate și netede și un control riguros al diametrului țevii și a grosimii de perete, se reduc spațiile productive

Cu toate avantajele sale, acest procedeu are și o serie de limite determinate, în principal, de necesitatea asigurării unui regim staționar în timpul tragerii, de apariția unor pliuri în zona deformării libere a țevii și altele.

Lucrarea de față are drept scop determinarea geometriei optime a focarului de deformare pentru asigurarea echilibrulu i dinamic al dornului astfel încît să se obțină: mărirea reducerii secțiunii țevii pe fiecare trecere, creșterea vitezei de tragere și reducerea consumului de energie.

2. Geometria focarului de deformare

Metalul, filiera și dornul flotant s-au reprezentat în fig 1. Se observă că materialul metalic inițial, țeava laminată sau extrudată, avînd diametrul exterior D_0, diametrul interior D_i și grosimea de perete T_0, se defor-

* Conf. dr. ing., catedra Tehnologia materialelor și sudură

mează în filieră rezultînd țeava trasă cu diametrul exterior D_{0f} diametrul interior D_{if} și grosimea de perete T_f.

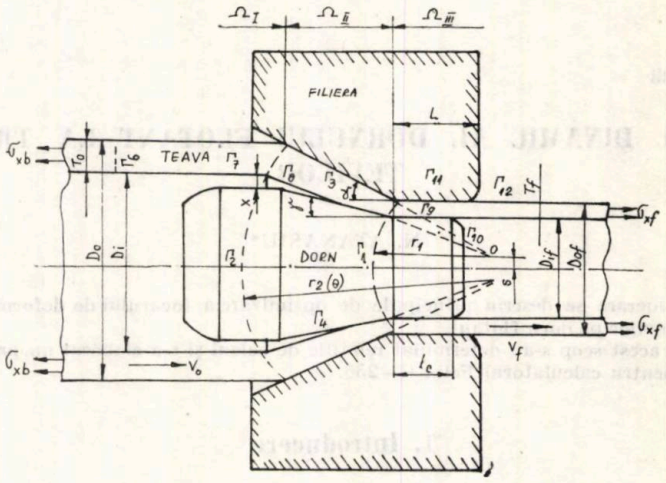


Fig. 1. — Geometria focarului de deformare la tragerea țevilor cu dorn flotant.

În focarul de deformare țeava este împărțită în trei zone. În zona Ω_I se află țeava nedeformată, înainte de intrare în filieră, în zona Ω_{II} se produce deformarea țevii iar în zona Ω_{III} se află țeava obținută prin tragere.

În zona Ω_I țeava cu grosimea inițială de perete $R_0 - R_i$ se deplasează ca un corp rigid cu viteza v_0, iar după ieșire din filieră, în zona Ω_{III}, țeava cu grosimea de perete $R_{0f} - R_{if}$ se deplasează, de asemenea, ca un corp rigid cu viteza v_f. În zona Ω_{II} materialul curge radial către polul 0 al conului.

Zona Ω_{II} este separată de zona Ω_I prin suprafața Γ_1 considerată arc de cerc cu raza r_1, avînd originea în polul 0 aflat la distanța s de axa de simetrie și de zona Ω_{III} prin suprafața Γ_2 cu raza r_2.

Folosind notațiile din fig. 1 se obține :

$$\sin \alpha = \frac{R_0 - s}{r_1} \Rightarrow r_1 = \frac{R_0 - s}{\sin \alpha} \tag{1}$$

$$\sin \gamma = \frac{R_i - s}{r_1} \Rightarrow r_1 = \frac{R_i - s}{\sin \gamma} \tag{2}$$

De unde rezultă ;

$$s = \frac{R_i \sin \alpha - R_0 \sin \gamma}{\sin \alpha - \sin \gamma} \tag{3}$$

$$r_1 = \frac{R_0 - R_i}{\sin \alpha - \sin \gamma} \tag{4}$$

Pentru o coroană circulară cuprinsă între razele $r_1 \sin\theta + s$ și R_i la intrare și $r_2(\theta)\sin\theta + s$ și R_{if} la ieșire se obține ecuația suprafeței $r_2(\theta)$, adică a suprafeței de discontinuitate Γ_2 :

$$r_2(\theta) = \frac{1}{\sin\theta}\left\{\sqrt{\frac{R_{0f}^2 - R_{if}^2}{R_0^2 - R_i^2}([r_1 \sin\theta + s)^2 - R_i^2] + R_i^2} - s\right\} \tag{5}$$

3. Cinematica procesului de deformare

Într-un sistem de coordonate curbilinii (r, θ și φ), componentele vitezei particulei sînt : v_r, v_θ și v_φ astfel că din condiția de simetrie rezultă : $v_\theta = v_\varphi = 0$, iar din condiția de incompresibilitate se obține viteza radială v_r :

$$v_r = \frac{C(\theta)}{r(r\sin\theta + s)} \tag{6}$$

Funcția $C(\theta)$ se determină din condiția de continuitate a componentei normale a vitezei la traversarea suprafeței Γ_1, adică $r = r_1$ și $v_r = v_0\cos\theta$, deci :

$$v_r = v_0 \frac{r_1(r_1\sin\theta + s)}{r(r\sin\theta + s)}\cos\theta \tag{7}$$

Datorită constantei volumului rezultă :

$$v_0 = \frac{R_{0f}^2 + R_{if}^2}{R_0^2 - R_i^2} v_f \tag{8}$$

Prin urmare componentele vitezei de deformare vor fi :

$$D_{rr} = -v_0 r_1(r_1\sin\theta + s)\cos\theta \frac{2r\sin\theta + s}{[r(r\sin\theta + s)]^2}$$

$$D_{\theta\theta} = v_0 \frac{r_1(r_1\sin\theta + s}{r^2(r\sin\theta + s)}\cos\theta$$

$$D_{\varphi\varphi} = v_0 \frac{r_1(r_1\sin\theta + s)}{r(r\sin\theta + s)^2}\sin\theta\cos\theta \tag{9}$$

$$D_{\theta\varphi} = -v_0 r_1 \frac{r(r_1\sin^3\theta + s^2\sin\theta - r_1 s\cos 2\theta)}{2r^2(r\sin\theta + s)^2}$$

$$D_{\theta\varphi} = D_{\varphi r} = 0$$

4. Echilibrul dornului în focarul de deformare

Forţele prezente în procesul de tragere a ţevilor cu dorn flotant s-au reprezentat în fig. 2. Se observă că la interfaţa dorn-ţeavă, pe porţiunea conică a dornului, presiunea normală determină o forţă N_c a cărei componentă axială tinde să expulzeze dornul, în timp ce forţele de frecare T_k şi T_c, pe porţiunea conică şi respectiv pe cea cilindrică, antrenează dornul în focarul de deformare.

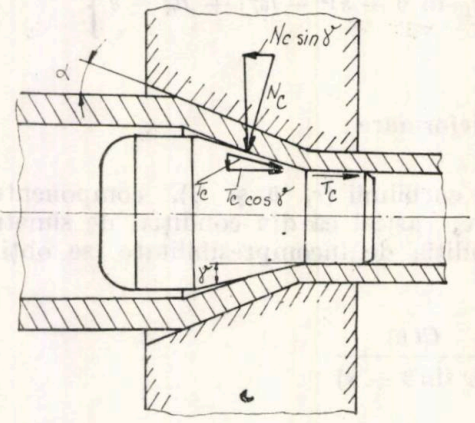


Fig. 2. — Echilibrul forţelor la tragerea ţevilor cu dorn flotant.

În consecinţă, una din premizele pentru desfăşurarea normală a tragerii ţevilor cu dorn flotant constă în menţinerea echilibrului dinamic dintre componenta axială a presiunii şi forţele de frecare.

Din fig. 2 rezultă :

$$N_c + T_k + T_c = 0 \tag{10}$$

unde :

$$N_c = 2\pi \int_{r_1}^{r_2} T_{\theta\theta}\Big|_{\theta=\gamma} (r \sin\gamma + s)\, dr \tag{11}$$

$$T_k = 2\pi \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\Pi_{T'}}\Big|_{\theta=\gamma} (r \sin\gamma + s)\, dr \tag{12}$$

$$T_c = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} m_2\, \sigma_c\, l_l\, R_{tf} \tag{13}$$

La tragerea ţevilor cu dorn flotant frecarea de contact se produce de-a lungul suprafeţei conice a filierei, la interfaţă ţeavă-filieră şi ţeavă dorn.

Pentru descrierea frecării de contact dintre sculele de deformare (filiera şi dornul) cu suprafeţe rigide şi materialul metalic prelucrat, considerat corp vîscoplastic, se aplică expresia :

$$|p_\tau| = m\sqrt{\Pi_{T'}} \tag{14}$$

Mărimea componentei axiale $T_{\theta\theta}$ se determină presupunînd că frecarea de contact dată de tensiunea tangenţială este egală cu frecarea descrisă cu legea lui Coulomb adică : $|p|_\tau = \mu |T_{\theta\theta}|$,

deci :

$$\mu T_{\theta\theta} = m_4 \sqrt{\Pi_T} \tag{15}$$

unde : μ este coeficientul de frecare ; $\Pi_{T'}$ — al doilea invariant al deviatorului tensiunilor ; m — factor de frecare constant.

Proiectînd (10) pe axa de simetrie a dornului se obține :

$$-N_c \sin\gamma + T_c \cos\gamma + T_c = 0 \tag{16}$$

Introducînd (11), (12) și (13) în (16) și efectuînd calcule necesare se obține lungimea l_c a porțiunii de calibrare a dornului :

$$l_c = \frac{m_4\sqrt{3}}{m_2 \sigma_c R_{if}} \left(\frac{\sin\gamma}{\mu} - \cos\gamma \right) \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\Pi_{T'}}\Big|_{\theta=\gamma} (r \sin\gamma + s)\, dr \tag{17}$$

Un alt element constructiv care influențează într-o măsură însemnată echilibrul dinamic al dornului flotant în focarul de deformare îl constituie semiunghiul conului dornului γ.

În vederea determinării valorilor optime ale semiunghiului s-a aplicat o formulare variațională a problemelor la limită a căror soluții reprezintă puncte extremale pentru funcționale definite pe mulțimi convexe.

Pentru domeniul V format din zonele Ω_I, Ω_{II} și Ω_{III}, în care materialul metalic prelucrat se comportă ca un corp rigid-vîscoplastic și pentru suprafețele de discontinuitate Γ_1 și Γ_2, expresia funcțională $F(v)$ este de formă :

$$F(v) = \int_V T_{ij} D_{ij}\, dV + \sum_{j=1}^{2} \int_{\Gamma_j} (t^+ \cdot v^+ - t^- \cdot v^-)\, d\sigma = \int_\Gamma t \cdot v \cdot d\sigma \tag{18}$$

în care : $T_{ij} D_{ij}$ reprezintă puterea tensiunii pe unitatea de volum ; t — valoarea vectorului tensiune pe Γ_T ; v-cîmpul de viteze cinematic admisibil.

Componentele vitezei de deformare D_{ij} se determină cu o ecuație constitutivă vîscoplastică de tip Bingham de formă :

$$D_{ij} = \frac{1}{2\eta} \left\langle 1 - \frac{\sigma_c}{\sqrt{3}\sqrt{\Pi_{T'}}} \right\rangle T'_{ij} \tag{19}$$

unde : η — coeficientul de vîscozitate dinamică ; σ_c — limita de curgere „medie" a materialului metalic prelucrat ; $\Pi_{T'}$ — al doilea invariant al deviatorului tensiunilor ; T'_{ij} — componentele deviatorului tensiunilor.

$$\sqrt{\Pi_{T'}} = \frac{\sigma_c}{\sqrt{3}} + 2\eta \sqrt{\Pi_D} \tag{20}$$

în care : $\sqrt{\Pi_D}$ reprezintă al doilea invariant al tensorului vitezei de deformare.

$$T_{ij} D_{ij} = \frac{2\sigma_c}{\sqrt{3}} \sqrt{\Pi_D} + 4\eta \Pi_D \tag{21}$$

Deci :

$$\int_V T_{ij} D_{ij} \, dV = \frac{4\pi\sigma_c}{\sqrt{6}} v_0 r_1 \Gamma_1 + 4\pi\eta (V_0 r_1)^2 I_2 \tag{22}$$

Calculul integralei pe suprafață de discontinuitate Γ_1 :

$$\int_{\Gamma_1} (t^+ \cdot v^+ - t^- \cdot v^-) d\sigma = v_0 \sigma_c \frac{\pi(R_0^2 - R_1^2)}{r_1(\cos\gamma - \cos\alpha) + s(\alpha - \gamma)} \cdot$$

$$\cdot \left[r_1 \left(\cos\theta + \frac{\cos^3\theta}{3} \right) \Big|_\gamma^\alpha + \frac{s}{2} \left(\theta - \frac{\sin 2\theta}{2} \Big|_\gamma^\alpha \right) \right] \tag{23}$$

Calculul integralei pe Γ_2 :

$$\int_{\Gamma_2} (t^+ \cdot v^+ - t^- \cdot v^-) \, d\sigma = -2\pi\sigma_{xf} I_7 + 2\pi\rho v_f^3 I_8 \tag{24}$$

Calculul integralei pe suprafața Γ_3 (suprafața de contact dintre filieră și materialul metalic prelucrat) unde viteza are numai o componentă tangențială cu v_r :

$$\int_{\Gamma_3} t \cdot v \cdot d\sigma = -2\pi m_3 v_0 r_1 R_0 \cos\alpha I_3 \tag{25}$$

Analog se calculează integrala pe suprafața Γ_4, suprafața de contact dintre porțiunea conică a dornului și materialul prelucrat :

$$\int_{\Gamma_4} t \cdot v \cdot d\sigma = -2\pi m_4 v_0 r_1 R_{of} \cos\gamma I_3 \tag{26}$$

Calculul integralei pe suprafața Γ_9 la contactul dintre porțiunea de calibrare a dornului și materialul metalic prelucrat

$$\int_{\Gamma_9} t \cdot v \cdot d\sigma = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}} m_2 \sigma_c v_f l_c R_{if} \tag{27}$$

Analog se calculează și integrala pe suprafața Γ_{11} :

$$\int_{\Gamma_{11}} t \cdot v \cdot d\sigma = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}} m_1 \sigma_c v_f L R_i \tag{28}$$

Introducînd (22) — (28) în (18) și efectuînd calculele necesare se obține expresia funcționalei $F(v)$ de formă :

$$F(v) = 2\pi v_0 \left\{ \sigma_{xb} \frac{R_0^2 - R_i^2}{2} \left[1 - \frac{r_1 \left(\cos\theta + \frac{\cos^3\theta}{3} \right) \Big|_\gamma^\alpha + \frac{s}{2} \left| \theta - \frac{\sin 2\theta}{2} \right) \right|_\gamma^\alpha}{r_1 (\cos\gamma - \cos\alpha) + s(\alpha - \gamma)} \right] + \right.$$

$$+ \frac{2\sigma_c}{\sqrt{6}} r_1 I_1 + m_3 r_1 R_0 \cos\alpha \frac{\sigma_c}{\sqrt{3}} \ln \left| \frac{r_1}{r_2(2)} \right| + m_4 r_1 R_{0f} \cos\gamma \ln \left| \frac{r_1}{r_2(\gamma)} \right| +$$

$$\left. + r_1 v_0 \eta \left[\sqrt{2}\, m_4 R_{if} \cos\gamma_4 I_4 + \sqrt{2}\, m_4 R_i \cos\gamma I_4 + I_2 \right] \right\} \qquad (29)$$

Valoare semiunghiului conului dornului γ se obține prin minimizarea funcționalei $F(v)$ pe mulțimea cîmpurilor cinematice admisibile definite de (18).

5. Rezultate numerice și experimentale

Pentru optimizarea geometriei focarului de deformare care să conducă la echilibrul dinamic al dornului s-a elaborat un program Fortran destinat calculatorului Felix C—256.

Programul este general, permițînd efectuarea unor analize complete asupra procesului tragerii cu dorn flotant astfel încît fabricarea țevilor să se desfășoare în condițiile unui consum energetic minim.

Din numărul mare de variante obținute pe calculator se vor reda în continuare numai unele rezultate pentru determinarea unor parametri

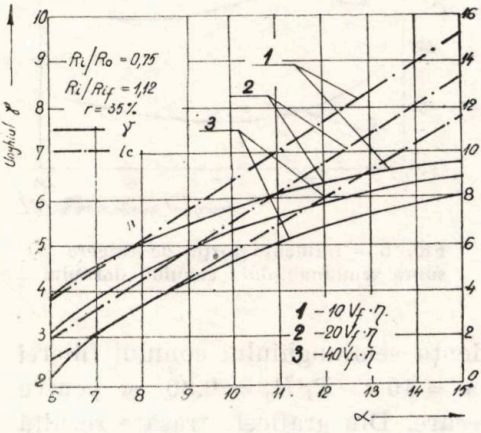


Fig. 3. — Variația dimensiunilor unghiului γ și a lungimii porțiunii de calibrare a dornului în funcție de unghiul filierei.

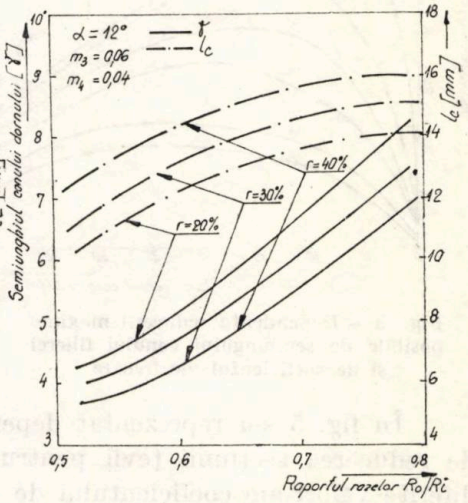


Fig. 4. — Variația unghiului γ și a lungimii l_c în funcție de raportul razelor R_0/R_i.

constructivi ai focarului de deformare în funcție de parametrii tehnologici care intervin în procedeul de tragere analizat. Astfel în fig. 3 s-a reprezentat modificarea dimensională a dornului (γ și l_c) în funcție de valorile semiunghiului conului filierei pentru reducerea procentuală a secțiunii țevii $r = 35$ %, pentru rapoartele grosimii de perete : $R_i/R_{if} = 1{,}12$ și pentru trei viteze de tragere. Se observă că semiunghiul conului dornului crește odată cu unghiul filierei care însă prezintă valori optime pentru $\alpha_{opt} = 15°$. Lungimea l_c a porțiunii de calibrare a dornului crește pe măsură ce unghiul filierei devine mai mare și scade cu sporirea vitezei de tragere pentru același α. La anumite viteze mari de tragere sau în cazul unor unghiuri α mici, lungimea l_c poate să scadă la zero, iar dornul flotant se va afla în echilibru fără porțiuea cilindrică. Creșterea în continuare a vitezei de tragere sau micșorarea suplimentară a unghiului α nu este posibilă întrucît dornul flotant nu-și va păstra echilibrul dinamic de focarul de deformare.

Pentru a observa influența dimensiunilor inițiale ale țevii (R_i/R_0) asupra dimensiunilor dornului γ și l_c s-au trasat graficele din fig. 4 pentri : $\alpha = 12°$, $R_i/R_{if} = 1{,}12$, coeficienți de frecare $m_3 = 0{,}06$ și $m_4 = 0{,}04$. Reducerea grosimii pereților determină creștere unghiului γ și a lungimii porțiunii de calibrare l_c.

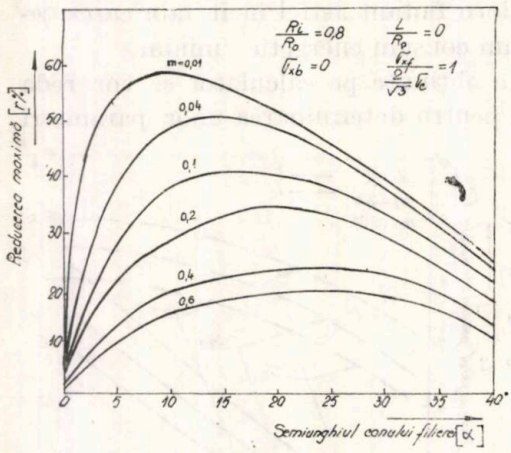


Fig. 5 — Dependența reducerii maxime posibile de semiunghiul conului filierei și de coeficientul de frecare.

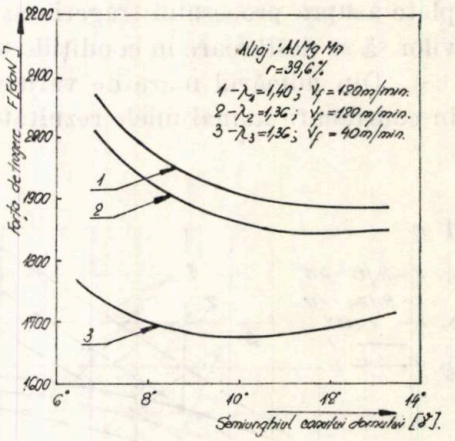


Fig. 6 — Influența forței de tragere asupra semiunghiului conului dornului.

În fig. 5 s-a reprezentat dependența semiunghiului conului filierei de reducerea secțiunii țevii pentru $\gamma = 10°$; $R_i/R_0 = 0{,}80$ și pentru diferite valori ale coeficientului de frecare. Din graficele trasate rezultă că prin creșterea coeficientului de frecare crește unghiul α în schimb scade reducerea maximă posibilă a secțiunii țevii.

Cercetările experimentale s-au efectuat în condițiile industriale pe o instalație de tras țevi prevăzută cu aparatura necesară măsurării forței de tragere și a vitezei de tragere.

Materialul experimental a fost constituit din țevi extrudate la cald din aliaje de aluminiu Al*Mg*Si0,5 și AlMgMn avînd dimensiuni inițiale Ø35×3,5 mm. Țevile trase aveau dimensiuni : Ø 20×2,0 mm din AlMgSi 10,5 și Ø12×1,5 mm din AlMgMn.

Filierele folosite la tragere au fost executate cu semiunghiul conului $\alpha = 10°$, 12 și 14°, iar dornurile flotante erau prevăzute cu unghiul de înclinare a porțiunii conice $\gamma = 8°$, 10° și 12°.

Tragerea s-a efectuat la trei viteze și anume $v_f = 100$, 140 și 180 m/min cu două reduceri de secțiuni a țevii pe fiecare trecere $r = 30$ % și 40 %.

Datele obținute din măsurătorile efectuate au permis construirea graficelor din fig. 6 pentru aliajul AlMgMn.Se observă că valoarea minimă a forței de tragere s-a obținut la un unghi al dornului $\gamma = 9°$ și al filierei $\alpha = 12°$ în cazul coeficientului de alungire $\lambda_1 = 1{,}36$.

6. Concluzii

1. Unghiul optim al conului dornului scade cu micșorarea unghiului filierei și cu creșterea grosimii pereților țevii, vitezei de tragere și frecării de contact.

2. Lungimea porțiunii de calibrare a dornului crește cînd unghiul filierei crește, viteza de tragere scade, frecarea de contact se micșorează și grosimea de perete scade.

3. Dornul flotant se află în echilibrul dinamic dacă se corelează geometria acestuia cu parametrii tehnologici ai procedeului (forța de tragere, viteza de lucru, reducerea secțiunii, frecarea de contact).

BIBLIOGRAFIE

1. *N. Atanasiu*, Tragerea țevilor pe dorn flotant. Echilibrul dinamic al dornului, Metalurgia, nr. 6, 1980, pg. 28.

2. *N. Atanasiu*, Optimizarea parametrilor tehnologici la tragerea țevilor cu dorn flotant, Metalurgia, nr. 8, 1980, pg. 408.

3. *N. Atanasiu, Gabriela Cercel*, Rohroziehen mit fliegendem dorn wirtschaftlicher gestalten, Bänder Bleche Rohre, nr. 12, 1980, pag. 539.

4. *N. Atanasiu*, Procedee moderne de tragere a barelor și țevilor, ,,Informstal'' (În limba rusă) nr. 1 (125), 1982, Editura ,,Ciornaia metalurghia'' Moscova.

5. *N. Atanasiu*, Criterii de proiectare a dornurilor flotante pentru tragerea țevilor, Metalurgia nr. 10. 1984, pg. 507.

6. *S. Cleja, N. Cristescu*, Influence of the Drawing Speed on the Optimum Shape of the Floating Plug., Mécanique Appliquée, nr. 3, 1979, pg. 357.

7. *B. Avitzur*, Metal — Forming Processes. Editura Edukatron, New-York, 1977, cap. 9.

The Dynamical Stability of the Floating Plug During Tubes Drawing

The paper described the way of optimizing the geometry of die in order to assure the dynamical stability of the floating plug during the tubes drawing. To this purpose there were determined the mathematical equations and a Fortran programme for Felix C—256 was worked out.

C. Z.: 518.12 : 536.7

UTILIZAREA FUNCȚIILOR SPLINE ÎN CALCULE TERMODINAMICE

D. TALOI*

În cadrul lucrării este prezentată o nouă modalitate de calcul al activității componenților în sisteme binare prin utilizarea funcțiilor spline cubice de o variabilă.

În lucrare sînt prezentate principalele relații privind stabilirea funcției spline de o variabilă, precum și modalitățile de aplicare practică la studiul sistemelor binare, în cadrul lucrării exemplificarea efectuîndu-se pe sistemul Pb—Bi.

1. Introducere

Dependența proprietăților termodinamice de parametrii de stare nu poate fi stabilită, teoretic, cu suficientă precizie din care cauză se recurge deseori la descrierea formală a acestor proprietăți pe baza unor relații empirice.

În acest sens, încă din 1895 Margules [1] a propus utilizarea următoarelor relații de calcul a mărimilor integral-molare și parțial-molare de exces :

$$y^E = x_1 x_2 (q_0 + q_1 x_2 + q_2 x_2^2 + \ldots), \tag{1}$$

$$y_1^E = x_2^2 (a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + \ldots), \tag{2}$$

$$y_2^E = x_1^2 (b_0 + b_1 x_2 + b_2 x_2^2 + \ldots), \tag{3}$$

în care y poate fi energie liberă, entalpie, entropie etc.

Coeficienții acestor șiruri nu sînt independenți, legăturile dintre ei fiind date de relațiile :

$$a_n = (n+1)(q_n - q_{n+1}); \qquad b_n = (n+1)\, q_n; \tag{4}$$

$$a_n = b_n - b_{n+1}\,(n+1)/(n+2). \tag{5}$$

În majoritatea cazurilor folosirea relațiilor lui Margules nu este oportună, deoarece în cele trei relații intervin coeficienți diferiți; în afară de aceasta, înlocuind în relațiile (1) — (3) variabila x_2 prin x_1, se obțin alți coeficienți.

Un alt inconvenient constă în faptul că, în intervalul de concentrații de la $x = 0$ la $x = 1$ șirurile lui Margules sînt neortogonale; astfel, în cazul șirurilor care conțin termeni de gradul șase, neortogonalitatea are valoarea $P = 0{,}9931$.

Este cunoscut faptul că în cazul polinoamelor neortogonale valorile primilor coeficienți depind puternic de gradul polinomului,

* Conf. dr. ing., catedra Metalurgia metalelor neferoase

adică la creşterea acestuia trebuie recalculate toate valorile coeficienţilor stabilite anterior. Se desprinde deci concluzia, că valorile coeficienţilor polinoamelor neortogonale nu pot avea o semnificaţie fizică anumită, ceea ce împiedică aprecierea proprietăţilor diferitelor sisteme prin compararea valorilor numerice ale coeficienţilor.

Un alt inconvenient al ecuaţiilor lui Margules este acela, că în domeniul valorilor mici ale concentraţiilor ($x \ll 1$) şi la valori mari ale lui n, x^n devine foarte mic din care cauză coeficientul a_n trebuie să capete o valoare foarte mare, astfel încît termenul $a_n x^n$ să fie semnificativ. Legat de aceasta trebuie spus că la $P > 0{,}99$, coeficienţii din ecuaţiile lui Margules trebuie să fie calculaţi cu o precizie mult mai mare în comparaţie cu datele iniţiale [2]. S-a stabilit [3], că în cazul utilizării ecuaţiilor lui Margules cu 19 termeni nu este suficientă chiar dubla precizie.

Aceste inconveniente au fost, în principal, eliminate prin folosirea polinoamelor [4, 5] Legendre care sînt strict ortogonale pe intervalul de concentraţii $0 \ll x \ll 1$.

Relaţia generală de recurenţă pentru polinomul $P_n(x)$ este de forma :

$$P_n(x) = \frac{(2n-1)(2x-1)}{n} P_{n-1} - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x), \tag{6}$$

ira primele trei funcţii Legendre au următorul aspect :

$$P_0(x) = 1; \qquad P_1(x) = 2x - 1; \qquad P_2(x) = 6x^2 - 6x + 1. \tag{7}$$

Entalpia liberă de exces a unei soluţii binare, precum şi entalpiile libere de exces ale celor doi componenţi se pot determina în acest caz cu relaţiile :

$$G^E = x_1 x_2 \sum_{n=0}^{n'} q_n P_n(x_2), \tag{8}$$

$$G_1^E = RT \ln \gamma_1 = x_2^2 \sum_{n=0}^{n'} a_n P_n(x_2), \tag{9}$$

$$G_2^E = RT \ln \gamma_2 = x_1^2 \sum_{n=0}^{n'} b_n P_n(x_2) \tag{10}$$

S-a propus de asemenea [6, 5], în ultimul timp, utilizarea altor funcţii cum sînt ecuaţiile Redlich-Keester pentru calcularea valorilor proprietăţilor termodinamice :

$$G^E = x_1 x_2 \sum_{j=1}^{k} q_j (1 - 2x_2)^{j-1}, \tag{11}$$

$$G_1^E = x_2^2 \sum_{j=1}^{k} q_j [(2j - 1 - 2jx_2)(1 - 2jx_2)^{j-2}] \tag{12}$$

$$G_2^E = x_1^2 \sum_{j=1}^{k} q_j [(1 - 2jx_2)(1 - 2x_2)^{j-2}]. \tag{13}$$

Deşi prin utilizarea relaţiilor (8) — (10) sau (11) — (13) se obţin rezultate care concordă mult mai bine cu datele experimentale decît

în cazul folosirii relațiilor lui Margules apar, totuși, situații cînd pentru a obține o corespondență foarte bună între valorile calculate și valorile experimentale trebuie utilizate polinoame cu un număr foarte mare de termeni (16, 20 sau chiar 50 [4]).

În cele ce urmează se propune utilizarea unei noi funcții de interpolare — *funcția spline cubică* — care este o funcție segmentar polinomială [7, 8], segmentele de polinoame racordîndu-se în noduri împreună cu derivatele de ordinul întîi și doi ale acestora. S-a demonstrat că funcția spline este funcția care are proprietatea de a converge către funcția continuă pe care o interpolează, dacă numărul nodurilor crește indefinit.

2. Funcția spline cubică de o variabilă

Fie $[a, b] \subset R$ și fie date punctele x_j, $j = 0,1,\ldots, N$, din acest interval. Se notează cu $\Delta : a = x_0 < x_1 < \ldots x_{N-1} < x_N = b$ o diviziune a acestui interval și cu $I_j = [x_{j-1}, x_j]$. Se notează cu $P_n(I_j)$ restricția polinoamelor de grad mai mic sau egal cu n pe intervalul $[x_{j-1}, x_j]$, iar cu $h_j := x_j - x_{j-1}$, $j = 1, 2,\ldots, N$.

Funcția $S_\Delta(x) : [a, b] \to R$ se numește funcție spline cubică, relativ la diviziunea Δ, dacă satisface următoarele condiții :

1) $S_\Delta | I_j \in P_3 (x_{j-1}, x_j)$, $\quad j = 1, 2,\ldots, N$;

2) $S_\Delta \in C^2 [a, b]$.

Fie $Y \in R^{N+1}$, $Y = (y_0, y_1,\ldots,y_N)$, un vector dat.

O funcție spline cubică $S_\Delta(x)$ se numește funcție spline cubică de interpolare pentru vectorul Y, pe diviziunea Δ, dacă satisface condițiile :

$$S_\Delta(x_j) = y_j, \qquad j = 0, 1,\ldots,N.$$

Se admite că $y_0, y_1,\ldots, y_N$ sînt definite de relațiile $y_j = y (x_j)$, $j = 0, 1,\ldots, N$, unde $y \in C^2[a, b]$.

Problema care trebuie rezolvată este de a găsi funcțiile spline cubice de interpolare pentru vectorul $Y \in R^{N+1}$, care pe intervalele I_j, $j = 1, 2, 3,\ldots, N$. să aproximeze suficient de bine funcțiile y, y', y''.

În rezolvarea acestei probleme se pornește de la premiza că funcția care exprimă variația derivatei de ordinul doi pe intervalul $[x_{j-1}, x_j)]$ este liniară.

Se notează $y''_j = y''(x_j) = M_j$, iar funcția spline cubică de interpolare care aproximează $y(x)$ pe intervalul $I_j = [x_{j-1}, x_j]$ de lungime $h_j = x_j - x_{j-1}$ cu $S_\Delta(x)$, derivatele ei pe același interval fiind notate cu $S'_\Delta(x)$ și $S''_\Delta(x)$. Scriind ecuația dreptei care trece prin punctele de coordonate (x_{j-1}, M_{j-1}), (x_j, M_j) și care aproximează funcția $y''(x)$ rezultă :

$$\frac{S''_\Delta(x) - M_{j-1}}{M_j - M_{j-1}} = \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}$$

sau

$$S''_\Delta(x) = M_{j-1} \frac{x_j - x}{h_j} + M_j \frac{x - x_{j-1}}{h_j}. \qquad (14)$$

Integrînd de două ori relaţia (14) rezultă :

$$S'_\Delta(x) = -M_{j-1}\frac{(x_j - x)^2}{2h_j} + M_j\frac{(x - x_{j-1})^2}{2h_j} + C_1 \tag{15}$$

$$S_\Delta(x) = M_{j-1}\frac{(x_j - x)^3}{6h_j} + M_j\frac{(x - x_{j-1})^3}{6h_j} + C_1 x + C_2. \tag{16}$$

Pentru a determina constantele de integrare C_1 şi C_2 se scrie relaţia (16) în punctele de abscisă $x = x_j$ şi $x = x_{j-1}$, unde funcţia spline de aproximare trebuie să aibă valorile date ale funcţiei y, adică $S_\Delta(x_j) = y_j$ şi $S_\Delta(x_{j-1}) = y_{j-1}$. Se obţine astfel :

$$M_j\frac{h_j^2}{6} + C_1 x_j + C_2 = y_j,$$

$$M_{j-1}\frac{h_j^2}{6} + C_1 x_{j-1} + C_2 = y_{j-1},$$

de unde rezultă

$$C_1 = \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} - \frac{h_j}{6}(M_j - M_{j-1}),$$

$$C_2 = \frac{x_j y_{j-1} - x_{j-1} y_j}{h_j} + \frac{h_j}{6}(x_{j-1} M_j - x_j M_{j-1}).$$

Înlocuind în relaţiile (15) şi (16) expresiile constantelor de integrare C_1 şi C_2 se obţin funcţiile spline de aproximare ale lui $y = f(x)$ şi $y' = f'(x)$ pe intervalul $I_j = [x_{j-1}, x_j]$:

$$S'_\Delta(x) = -M_{j-1}\frac{(x_j - x)^2}{2h_j} + M_j\frac{(x - x_{j-1})^2}{2h_j} + \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} - \frac{M_j - M_{j-1}}{6}h_j; \tag{17}$$

$$S_\Delta(x) = M_{j-1}\frac{(x_j - x)^3}{6h_j} + M_j\frac{(x - x_{j-1})^3}{6h_j} + \left(y_{j-1} - \frac{M_{j-1}h_j^2}{6}\right)\frac{x_j - x}{h_j} + \left(y_j - \frac{M_j h_j^2}{6}\right)\frac{x - x_{j-1}}{h_j}. \tag{18}$$

Derivata de ordinul trei $y'''(x)$ este aproximată pe intervalul I_j printr-o constantă avînd valoarea

$$S'''_\Delta(x) = \frac{M_j - M_{j-1}}{h_j}. \tag{19}$$

Este evident că pentru a aproxima funcţia $y = f(x)$ şi derivatele sale pe tot intervalul $[a, b]$ expresiile de forma (14), (17) şi (18) vor trebui scrise corespunzător fiecărui interval I_j, $j = 1, 2, \ldots, N$ şi pentru a putea utiliza aceste relaţii de aproximare trebuie determinate valorile derivatei de ordinul doi $y''_j = M_j$ în punctele $x = x_j$, $j = 0, 1, \ldots, N$.

Avînd în vedere că segmentele de polinoame scrise pe intervalele I_j se racordează în noduri, se poate scrie :

$$\lim_{\substack{x\to x_j \\ x<x_j}} S'_\Delta(x) = \lim_{\substack{x\to x_j \\ x>x_j}} S'_\Delta(x) \tag{20}$$

Din relaţia (17) rezultă

$$\lim_{\substack{x\to x_j \\ x<x_j}} S'_\Delta(x) = M_j \frac{h_j}{2} + \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} - \frac{M_j - M_{j-1}}{6} h_j$$

$$= M_{j-1}\frac{h_j}{6} + \frac{M_j h_j}{3} + \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j}. \tag{21}$$

Funcţia care aproximează derivata de ordinul întîi $y'(x)$ pe intervalul $[x_j,\ x_{j+1}]$ este de forma (17) cu indicii scrişi în mod corespunzător, adică

$$S'_\Delta(x) = -M_j \frac{(x_{j+1} - x)^2}{2\,h_{j+1}} + M_{j+1}\frac{(x - x_j)^2}{2\,h_{j+1}} + \frac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}} - \frac{M_{j+1} - M_j}{6} h_{j+1} \tag{22}$$

$$\lim_{\substack{x\to x_j \\ x>x_j}} S'_\Delta(x) = -M_j \frac{h_{j+1}}{2} + \frac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}} - \frac{M_{j+1} - M_j}{6} h_{j+1} =$$

$$= -M_{j+1}\frac{h_{j+1}}{6} - M_j \frac{h_{j+1}}{3} + \frac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}}. \tag{23}$$

Pe baza relaţiilor (20), (21) şi (23) se poate scrie egalitatea :

$$\frac{h_j}{6} M_{j-1} + \frac{h_j + h_{j+1}}{3} M_j + \frac{h_{j+1}}{6} M_{j+1} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j}. \tag{24}$$

Pentru $j = 1, 2, \ldots, (N-1)$ se pot scrie $N-1$ relaţii de tipul (24). Analizînd condiţiile de la capetele intervalului $[a, b]$ se pot obţine încă două relaţii. Scriind relaţia (17) pentru intervalul $[x_0,\ x_1]$ rezultă

$$S'_\Delta(x) = -M_0 \frac{(x_1 - x)^2}{2\,h_1} + M_1 \frac{(x - x_0)^2}{2\,h_1} + \frac{y_1 - y_0}{h_1} - \frac{M_1 - M_0}{6} h_1. \tag{25}$$

Ştiind că

$$\lim_{\substack{x\to x_0 \\ x>x_0}} S'_\Delta(x) = y'_0$$

relaţia (25) devine

$$2\,M_0 + M_1 = \frac{6}{h_1}\left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y'_0\right). \tag{26}$$

Procedînd similar pentru intervalul $[x_{N-1},\ x_N]$ rezultă egalitatea

$$M_{N-1} + 2\,M_N = \frac{6}{h_N}\left(y'_N - \frac{y_N - y_{N-1}}{h_N}\right). \tag{27}$$

Împărţind relaţia (24) cu $h_j + h_{j+1}$ şi notînd

$$\frac{h_{j+1}}{h_j + h_{j+1}} = \lambda_j, \qquad \frac{h_j}{h_j + h_{j+1}} = \mu_j, \qquad \lambda_j + \mu_j = 1 \tag{28}$$

se obţine

$$\mu_j M_{j-1} + 2 M_j + \lambda_j M_{j+1} = \frac{6\,[(y_{j+1} - y_j)/h_{j+1} - (y_j - y_{j-1})/h_j]}{h_j + h_{j+1}} \tag{29}$$

Relaţiile (26), (27) şi (29) formează un sistem de $N + 1$ ecuaţii cu $N + 1$ necunoscute $M_0, M_1, \ldots M_{N-1}, M_N$ de forma

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_0 & 0\ldots0 & 0 & 0 \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1\ldots0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & 2\ldots0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot\ldots\cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot\ldots\cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0\ldots2 & \lambda_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0\ldots\mu_{N-1} & 2 & \lambda_{N-1} \\ 0 & 0 & 0\ldots0 & \mu_N & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ M_{N-2} \\ M_{N-1} \\ M_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ d_{N-2} \\ d_{N-1} \\ d_N \end{bmatrix} \tag{30}$$

în care

$$d_0 = \frac{6}{h_1}\left(\frac{y_1 - y_0}{h_1} - y'_0\right), \tag{31}$$

$$d_j = 6\,\frac{(y_{j+1} - y_j)/h_{j+1} - (y_j - y_{j-1})/h_j}{h_j + h_{j+1}}, \tag{32}$$

$$d_N = \frac{6}{h_N}\left(y'_N - \frac{y_N - y_{N-1}}{h_N}\right). \tag{33}$$

În practică se consideră $\lambda_0 = \mu_N = 1$.

3. Studiul termodinamic al sistemului Pb—Bi ($T = 700\ K$)

Valorile activităţii bismutului la diferite compoziţii ale aliajului sînt trecute în tabelul 1 [9].

Tabelul 1

Activitatea Bi în sistemul binar Pb—Bi

x_{Bi}	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
a_{Bi}	0,000	0,052	0,115	0,195	0,293	0,406	0,530	0,656	0,779	0,895	1,000

Pentru determinarea funcţiei cubice spline de interpolare pe diviziunea $\Delta: 0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_9 < x_{10} = 1$ se folosesc următoarele notaţii: $h_1 = h_2 = \ldots = h_{10} = 0{,}1$; $\lambda_1 = \lambda_2 \ldots = \lambda_9 = \frac{1}{2}$; $\lambda_0 = 1$;

$\mu_1 = \ldots \mu_9 = \frac{1}{2}$; $N = 10$; $x_{Bi} = x$; $a_{Bi} = y$; $y'_0 = \gamma^{\circ}_{Bi} = 0{,}49$; $y'_{10} = 1$; $\mu_{10} = 1$.

Cu ajutorul relaţiilor (31) — (33) se calculează $d_j (j = 0{,}1, \ldots, 10)$ obţinîndu-se următoarele valori:

$d_0 = 1{,}8$; $d_1 = 3{,}3$; $d_2 = 5{,}1$; $d_3 = 5{,}4$; $d_4 = 4{,}5$; $d_5 = 3{,}3$; $d_6 = 0{,}6$; $d_7 = -0{,}9$; $d_8 = -2{,}1$; $d_9 = -3{,}3$; $d_{10} = -3$.

Se stabileşte sistemul de ecuaţii (30)

$$2M_0 + M_1 = 1{,}8$$

$$\frac{1}{2}M_0 + 2M_1 + \frac{1}{2}M_2 = 0{,}33$$

$$\frac{1}{2}M_1 + 2M_2 + \frac{1}{2}M_3 = 5{,}1$$

$$\frac{1}{2}M_2 + 2M_3 + \frac{1}{2}M_4 = 5{,}4$$

$$\frac{1}{2}M_3 + 2M_4 + \frac{1}{2}M_5 = 4{,}5$$

$$\frac{1}{2}M_4 + 2M_5 + \frac{1}{2}M_6 = 3{,}3$$

$$\frac{1}{2}M_5 + 2M_6 + \frac{1}{2}M_7 = 0{,}6$$

$$\frac{1}{2}M_6 + 2M_7 + \frac{1}{2}M_8 = -0{,}9$$

$$\frac{1}{2}M_7 + 2M_8 + \frac{1}{2}M_9 = -2{,}1$$

$$\frac{1}{2}M_8 + 2M_9 + \frac{1}{2}M_{10} = -3{,}3$$

$$M_9 + 2M_{10} = -3,$$

se rezolvă şi se obţin următoarele rezultate:

$M_0 = 0{,}3429$; $M_1 = 1{,}1142$; $M_2 = 1{,}8003$; $M_3 = 1{,}8846$; $M_4 = 1{,}4613$; $M_5 = 1{,}2703$; $M_6 = 0{,}0574$; $M_7 = -0{,}2999$; $M_8 = -0{,}6577$; $M_9 = -1{,}2692$; $M_{10} = -0{,}8654$.

Funcţia spline de interpolare pe intervalul $[x_{j-1}, x_j]$ este de forma $S_\Delta(x) = a_j x^3 + b_j x^2 + c_j x + d_j$, coeficienţii a_j, b_j, c_j, d_j fiind trecuţi în tabelul 2.

Tabelul 2

Valorile coeficienților funcției spline cubice

Intervalul de interpolare	Coeficienții funcției spline			
	a	*b*	*c*	*d*
$I_1 = [0;0,1]$	1,28550	0,17145	0,49000	0
$I_2 = [0,1:0,2]$	1,1435	0,21405	0,48574	0,000142
$I_3 = [0,2,0,3]$	0,1405	0,81585	0,36538	0,008166
$I_4 = [0,3;0,4]$	−0,7055	1,57725	0,13696	0,03108
$I_5 = [0,4;0,5]$	−0,318(3)	1,11265	0,322798(3)	0,006230
$I_6 = [0,5;0,6]$	−2,0215	3,6674	−0,954575	0,219125
$I_7 = [0,6;0,7]$	−0,5955	1,1006	0,585505	−0,088891
$I_8 = [0,7;0,8]$	−0,596(3)	1,10235	0,584278(3)	−0,088604
$I_9 = [0,8;0,9]$	−1,0191(6)	2,11715	−0,22756(3)	0,127888
$I_{10} = [0,9;10]$	0,6730	−2,4517	3,8844	−1,1057

4. Concluzii

— Funcția spline cubică de o variabilă se dovedește deosebit de utilă în calculele termodinamice referitoare la activitatea componenților în sisteme binare.

— Pentru un interval de concentrații $x \in [0, 1]$, valorile derivatei $S'_\Delta(x)$ la capetele intervalului se aproximează cu suficientă exactitate prin valorile limită ale coeficientului de activitate.

— În cazul sistemului studiat Pb—Bi, care stă la baza procesului de debismutizare a plumbului, valorile funcției spline pe domeniul de concentrații $x_{Bi} \in [0;0,1]$ permit urmărirea procesului de rafinare termică a plumbului cu suficientă exactitate.

BIBLIOGRAFIE

1. *M. Margules*, Sitzber. Acad. Wiss. Wien, Mathemat. Natur. W., 1895. AB/11, a Bd 104, S. 1 243—1 278.
2. *J. Eliezer, R. A. Howald*, U.S. Dep. Commerce Nat. Bur. Stand. Spec. Pull, 1978, nr. 496, p. 846—906.
3. *C. W. Bale, A. D. Pelton*, Canad. Met. Quart., 1975, v. 14, Nr. 3, p. 213—219.
4. *C. W. Bale, A. D. Pelton*, Met. Trans. 1974, v. 5, p. 2 323—2 337.
5. *V. M. Glazov, L. M. Pavlova*, Himicescaia termodinamica i fazovîie ravnovesia, Izd. Metallurghia, Moscva, 1981.
6. *N. Brouwer, J. A. J. Oonk*, Z. physik. Chem. Neue Folge, 1977, Bd. 105, H 3/4, S. 113—123.
7. *I.Fejes*, Funcții spline în teoria mecanismelor., Ed. Științifică și enciclopedică, București, 1981
8. *Gh. Micula*, Funcții spline și aplicații. Ed. Tehnică, București, 1978.
9. *R. Hultgren, P. D. Desai, și alții*, Selected Values of the Thermodynamic Properties of Binary Alloys, A.S.M., Metals Park, Ohio 44073, 1973.

Use of Spline Functions in Thermodynamic Calculations

In the paper a new technique is presented for the calculation of components activity in binary systems. The method is based on the use of one-variable cubic spline functions.

The main equations are given for the construction of the one-variable spline function as well as their practical application to the study of binary systems with direct reference to the lead-bismuth system.

C. Z.: 669.162.14

POSIBILITĂȚI DE OBȚINERE A UNOR FONTE DE ÎNALTA PURITATE PENTRU TURNĂTORIE

V. BRABIE, P. TOBOC, G. NEAGU*

În lucrare se prezintă considerații teoretice și practice privind posibilitățile de obținere a unor fonte de înaltă puritate pentru turnarea pieselor. Se dau date privind injectarea unor adaosuri pe bază de Na_2CO_3 sau CaO în vederea desulfurării și defosforării fontelor.

Necesitatea asigurării unei calități sporite producției de piese turnate, ca urmare a dezvoltării impetuoase a subramurilor de vîrf din industria constructoare de mașini a determinat promovarea pe scară largă a unor tehnologii și procedee care să asigure îmbunătățirea continuă a proprietăților aliajelor turnate în piese. În acest sens micșorarea la conținuturi foarte scăzute a unor elemente nedorite în aliaje constituie o preocupare permanentă a specialiștilor metalurgi.

Este cunoscut că pentru obținerea unor piese turnate din fonte și oțeluri, cu proprietăți de plasticitate și tenacitate ridicate, un rol important îl au sulful și fosforul. Ca urmare au crescut preocupările în vederea realizării unor tehnologii care să permită o micșorare pronunțată a conținuturilor acestor elemente.

Cercetările efectuate în ultimul timp în privința desulfurării avansate urmăresc în continuare două direcții devenite tradiționale și anume utilizarea carbonatului de sodiu și a oxidului de calciu. În schimb, metodele utilizate pentru introducerea acestora în aliajul lichid sînt diferite, rezultate foarte bune obținîndu-se prin metoda injectării agentului desulfurant în baia metalică.

Metoda constă în injectarea în baia metalică a amestecurilor reactive, cu ajutorul unui gaz inert prin intermediul unei lănci de insuflare. Eficiența acestui procedeu se poate aprecia pe baza legii întîi a lui Fick :

$$n_s = -\frac{D}{\delta} A \Delta C,$$

în care : n_s este fluxul de agent desulfurant ;
D — coeficientul de difuzie ;
δ — grosimea stratului limită ;
A — suprafața de contact ;
ΔC — gradientul de concentrație.

* Șef lucrări dr. ing., Șef lucrări ing., Asist. ing., catedra Turnătorie — Agregate

Deoarece procesele metalurgice într-o baie de aliaj lichid se desfășoară într-un interval relativ mic de temperatură, coeficientul de difuzie D variază foarte puțin, spre deosebire de suprafața de reacție, care poate fi mărită prin utilizarea adaosurilor în stare solidă sub formă de pulbere. Procedeul injecției conduce astfel la viteze mari de reacție, putîndu-se afirma că tratarea prin injecții este o aplicație logică a condiției optime pentru transferul de masă.

Procedeele de desulfurare și defosforare desfășurîndu-se în condiții termodinamice diferite, defosforarea necesitînd temperaturi joase și valori P_{O_2} ridicate, iar desulfurarea temperaturi ridicate și valori P_{O_2} scăzute, nu s-a încercat pînă de curînd realizarea celor două procese simultan în același agregat.

Deși tratamentul fontei lichide cu carbonat de sodiu se practică de multă vreme, în ultima perioadă datorită noilor tehnologii utilizate a renăscut interesul pentru acest agent desulfurant, stabilindu-se că în anumite condiții termodinamice sodiul poate elimina și fosforul din fonta lichidă. Acest lucru este posibil deoarece activitățile sulfului și fosforului în echilibru cu Na_2O la 1 400°C pot atinge valori mai mici de 0,001% pentru valori ale lui P_{O_2} în intervalul 0,1...0,001, figura 1. În aceste condiții procesele de desulfurare și defosforare nu mai sînt dependente de valorile lui P_{O_2} și pot avea loc concomitent în intervalul menționat mai sus indiferent de valorile lui a_{O_2}.

Pentru realizarea defosforării, conținutul de siliciu al băii metalice nu trebuie să depășească o anumită valoare, după cum se poate observa în figura 2, întîi avînd loc oxidarea siliciului și după aceea micșorarea conținutului de fosfor.

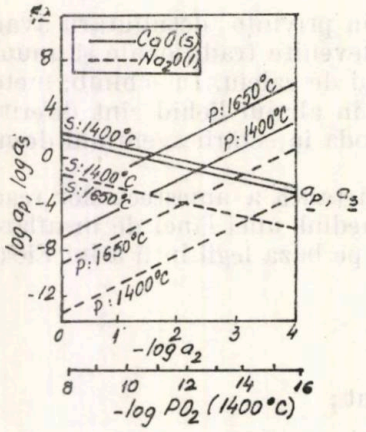


Fig. 1 — Activitatea P și S în aliajul lichid, în echilibru cu Na_2O și CaO

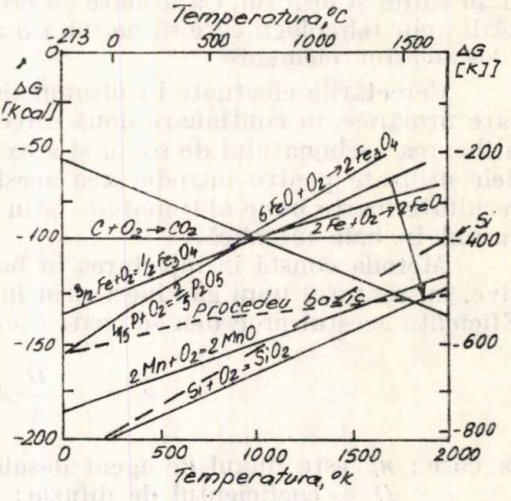


Fig. 2 — Modificarea echilibrului P—Si

În figura 3 sînt prezentate rezultatele de laborator referitoare la variația compoziției chimice a unor fonte brute în timpul tratamentului prin injecție la temperatura de 1300°C și respectiv 1 500°C. În tabelul 1

şi figura 4 se prezintă rezultatele de laborator referitoare la variaţia compoziţiei chimice a unor fonte de a doua fuziune în timpul tratamentului prin injecţie la temperatura de 1350°C şi respectiv 1400°C. Cantitatea de fontă supusă tratamentului a fost de 5 kg, probele fiind prelevate din 30 în 30 s. Alura curbelor de desulfurare şi defosforare ne arată că o continuare a tratamentului ar fi putut conduce la grade mai ridicate de desulfurare.

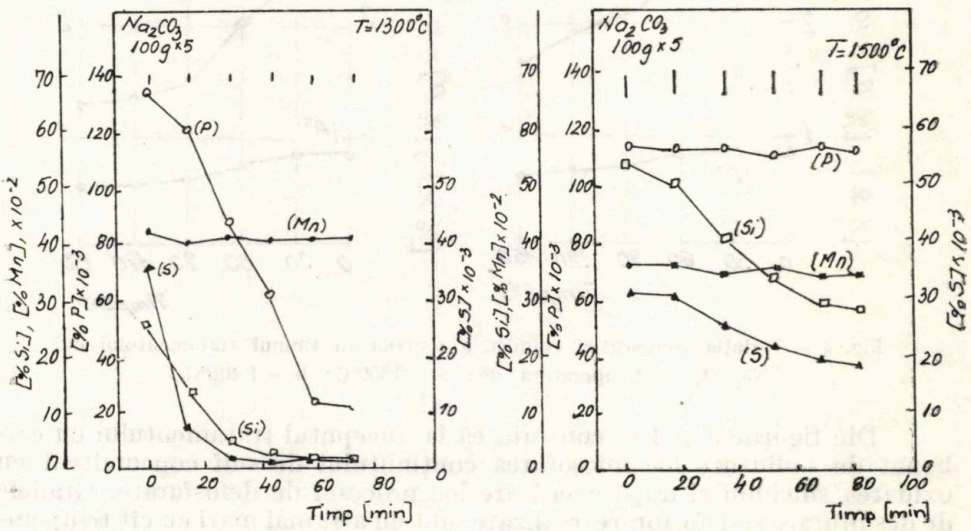


Fig. 3 — Variaţia compoziţiei chimice a fontelor brute în timpul tratamentului cu Na_2CO_3 la temperatura de: a — 1 300°C; b — 1 500°C

Tabelul 1

Variaţia compoziţiei chimice a fontelor tratate prin injecţie cu Na_2CO_3

Element	Temperatura în °C	Timpul, în s					
		0	30	60	100	120	150
% Si	1350	3,50	3,28	3,12	3,20	2,96	2,92
	1400	3,51	3,36	3,29	3,16	3,09	3,02
% Mn	1350	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14	0,135
	1400	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14
% S	1350	0,032	0,026	0,021	0,015	0,014	0,013
	1400	0,034	0,030	0,025	0,021	0,019	0,017
% P	1350	0,08	0,08	0,075	0,066	0,065	0,061
	1400	0,08	0,08	0,078	0,07	0,067	0,064

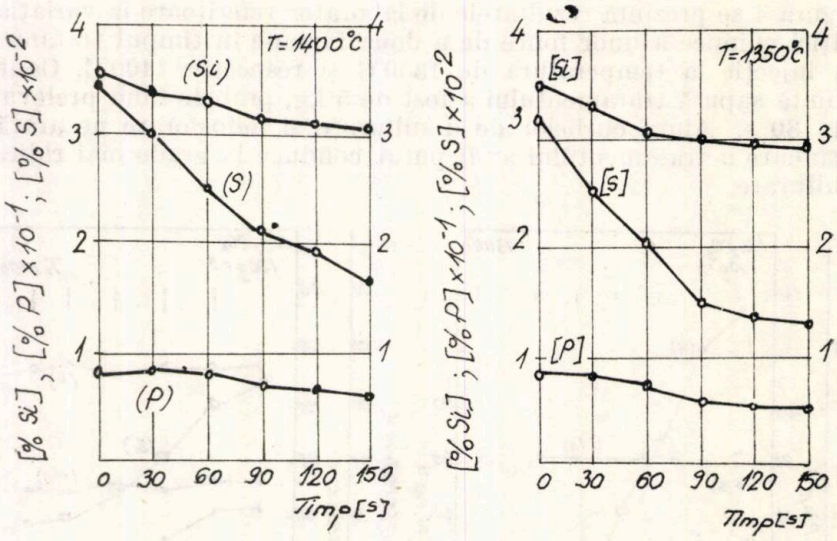


Fig. 4 — Variația compoziției chimice a fontelor în timpul tratamentului cu Na_2CO_3 la temperatura de: a — 1350°C; b — 1 400°C.

Din figurile 3 și 4 se constată că la începutul tratamentului cu carbonat de sodiu are loc micșorarea conținutului de sulf concomitent cu oxidarea siliciului și după aceea are loc procesul de defosforare. Gradele de desulfurare și defosforare realizate sînt cu atît mai mari cu cît temperatura este mai scăzută și conținutul de siliciu al fontei lichide mai mic. Aceasta se explică prin reacția care are loc între carbonatul de sodiu și siliciul din fonta lichidă

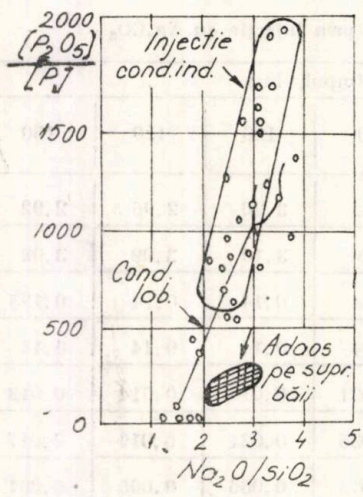


Fig. 5 — Rezultate comparative privind diferite metode de defosforare a aliajelor feroase

$$(Na_2CO_3) + [Si] \rightarrow (Na_2O \cdot SiO_2) + [C]$$

Metasilicatul stabil, rezultat în urma acestei reacții, duce la micșorarea conținutului de carbonat de sodiu care participă la reacții. Totodată și carbonul micșorează cantitatea de carbonat de sodiu care participă la desulfurare și defosforare prin reacția :

$$(Na_2CO_3) + 2[C] \rightarrow 2\,Na(g) + 3\,CO(g)$$

După cum se poate observa ambele reacții sînt favorizate de temperatura ridicată.

În figura 5 se prezintă comparativ gradele de defosforare realizate prin metoda injecției (la scară industrială și de laborator) și adăugarea pe suprafața băii de Na_2CO_3 urmată de agitarea băii cu azot.

Tratamentul prin injecţie permite realizarea unor grade de defosforare ridicate deoarece reacţia de defosforare este favorizată de presiunea ferostatică a topiturii ca urmare a diminuării pierderilor de carbonat de sodiu prin evaporare, pierderi care au loc conform reacţiilor;

$$\frac{4}{5}[P] + Na_2CO_3 = (Na_2O) + \frac{2}{5}(P_2O_2) + [C];$$

$$(P_2O_5) + 5[C] = 2[P] + 5CO(g);$$

$$Na_2CO_3 + [C] = (Na_2O) + 2CO(g);$$

$$(Na_2O) + [C] = 2Na(g) + CO(g).$$

Experimentări la scară industrială a metodei injecţiei au dus la realizarea unor grade de defosforare de 90% pentru fonte brute cu un conţinut de 0,13...0,23% Si comparativ cu grade de 40% obţinute prin adăugarea de Na_2CO_3 în oală. Consumul de agent a fost de 16 kg/t.

Paralel cu cercetările privind utilizarea carbonatului de sodiu s-au studiat şi posibilităţile de folosire a varului sub formă de pulbere.

Reacţia de desulfurare cu var poate fi scrisă :

$$(CaO) + [S] = CaS + [0].$$

În aceste condiţii utilizarea varului pur ca agent desulfurant duce la rezultate limitate deoarece în urma reacţiei de desulfurare se eliberează oxigen care este fixat de Si din baia metalică, conform reacţiei :

$$3(CaO) + 2[S] + [Si] = 3(CaS) + (SiO_2).$$

Silica ce rezultă din reacţie duce la formarea unui strat de silicat de calciu care împiedică transferul sulfului în granulele de var.

Pentru îmbunătăţirea rezultatelor tratamentului cu pulbere CaO se recomandă utilizarea unui agent dezoxidant puternic (Al, Mg, Ti) cu scopul de a elimina posibilitatea de formare a silicatului de calciu. La introducerea aluminiului în baia metalică reacţia care are loc şi care favorizează obţinerea unor grade ridicate de desulfurare este următoarea :

$$3(CaO) + [S] + 2[Al] = 3(CaS) + (Al_2O_3).$$

În figura 6 se prezintă rapoartele de desulfurare obţinute la tratarea fontei lichide cu un agent dezoxidant injectat împreună cu pulbere de var sau introdus separat.

Experimentările au fost efectuate la temperatura de 1 400°C pe o fontă lichidă cu următoarea compoziţie : C = 4%; Mn = 0,55%; Si = = 0,4%; P = 0,1%; S = 0,03—0,08%. În timp ce amestecurile CaO—

$-CaC_2$ (85% — 15%) și CaO — Mg (98% — 2%) au fost injectate, titanul (1 kg/t) și aluminiul (0,4 kg/t) au fost introduse pe fundul oalei, după aceea avînd loc injecția de pulbere de CaO.

Se poate observa că în timp ce gradele de desulfurare realizate pe baza amestecurilor de CaO cu Ti, Mg, CaC_2, sînt aproximativ egale și nu diferă prea mult de cele realizate numai cu CaO, utilizarea aluminiului crește randamentul desulfurării pînă la 85—90%.

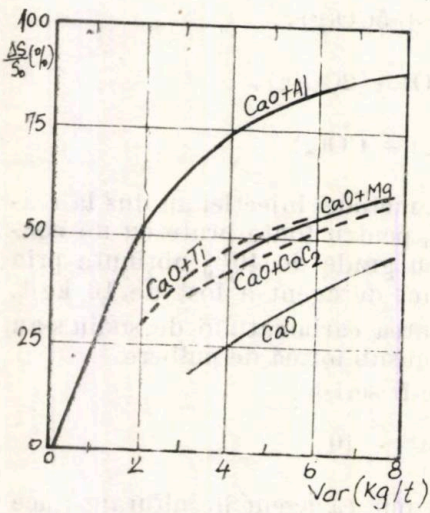


Fig. 6 — Influența cantității de var și a diferiților dezoxidanți asupra gradului de desulfurare

Încercările experimentale proprii au constat în injectarea în fonta lichidă la temperaturile de 1350°C și respectiv 1400°C a pulberii de var și a unor amestecuri CaO : CaF_2 (70%—30%) și CaO—CaF_2 — C (60% — 20% — 20%). În figura 7 se prezintă variația conținutului de sulf în timp pentru fiecare agent desulfurant iar în figura 8 gradele de desulfurare obținute. Experimentările au fost făcute pe o cantitate de 5 kg fontă lichidă probele fiind prelevate din 30 în 30 s.

Se poate observa că atît în cazul folosirii pulberii de var cît și a amestecurilor pe bază de var creșterea temperaturii influențează pozitiv gradul de desulfurare. De asemenea se poate constata că viteza de desulfurare este mare ca urmare a suprafeței de reacție mărite și a distanței mai mici de difuzie a agentului desulfurant.

Rezultate foarte bune în desulfurarea fontelor brute de turnătorie au fost obținute prin utilizarea unui amestec format din 70% $CaCO_3$, 22% CaO, 3% CaF_2, 5% C. Avantajele care rezultă din utilizarea acestui amestec constau în :

— costul mai scăzut al $CaCO_3$, față de CaO;

— apariția în urma descompunerii termice a carbonatului de calciu, a unor particule fine de CaO care nu se aglomerează și dispersează ușor în baia metalică;

— bioxidul de carbon rezultat în urma reacției de descompunere a carbonatului de calciu reacționează cu carbonul din baia metalică, formîndu-se CO care sporește gradul de agitare al băii;

— pierderile de căldură datorate descompunerii carbonatului de calciu, sînt compensate prin reacția exotermă de oxidare a siliciului de către CO_2.

Rezultatele obținute prin injectarea a 9 kg/t de amestec pe bază de carbonat de calciu avînd ca agent purtător argonul (6 l/kg amestec) se prezintă în figura 9. Conținutul inițial de sulf al fontei a fost de 0,035... ...0,040%, iar conținutul final de 12 ppm în comparație cu 21 ppm obținut în cazul utilizării numai a CaO.

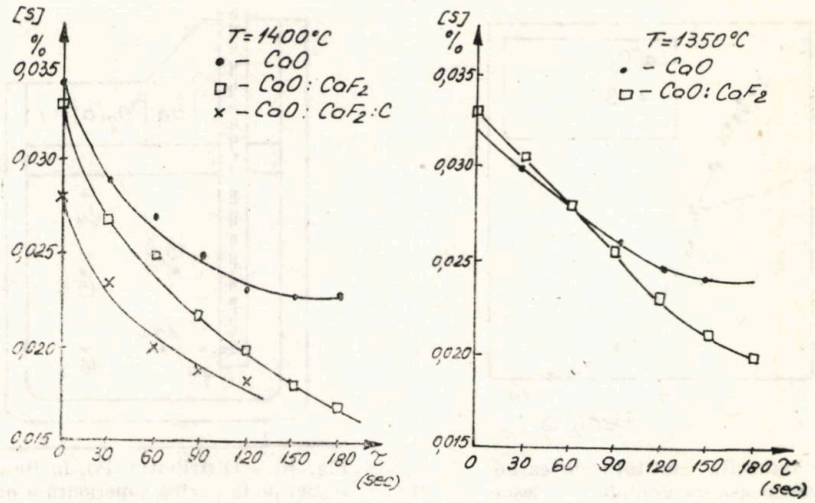


Fig. 7 — Variaţia conţinutului de sulf în timpul tratamentului prin injecţia de CaO şi agenţi pe bază de CaO

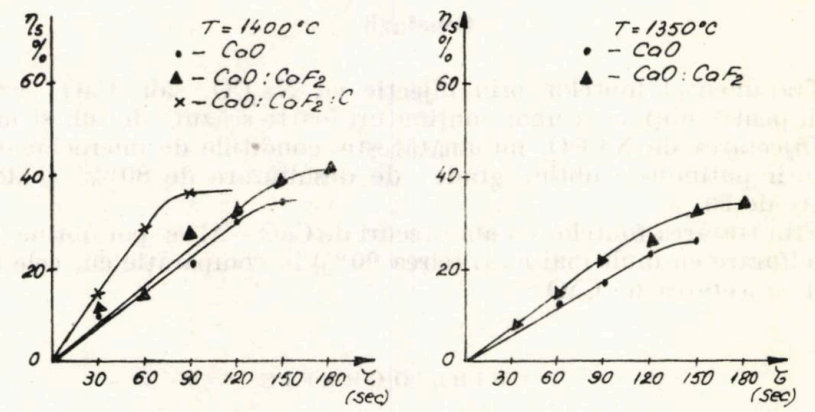


Fig. 8 — Grade de desulfurare realizate prin injecţie de CaO şi agenţii pe bază de CaO

Ca şi în cazul utilizării carbonatului de sodiu s-a urmărit realizarea concomitentă a desulfurării şi defosforării fonte or.

După cum se poate constata din figura 1 în cazul utilizării CaO, $a_P \leqslant 0{,}001$ şi $a_S \leqslant 0{,}001$ atunci cînd $a_0 \leqslant 0{,}1$ şi respectiv $a_0 \geqslant 0{,}001$, deci condiţiile pentru desfăşurarea reacţiei de defosforare trebuie să fie diferite de cele pentru desulfurare. Acest impediment poate fi rezolvat prin aplicarea tehnologiei injecţiei, amestecurile de $CaO—CaF_2$ sau $CaO—CaF_2—Fe_2O_3$ fiind injectate adînc în interiorul băii metalice cu gaz purtător $O_2—N_2$.

În figura 10 este prezentată distribuţia P_{O_2} corespunzătoare injecţiei pe la partea superioară a oalei. Se constată că valorile lui P_{O_2} sînt ridicate în zona de injectare şi se micşorează spre interfaţa aliaj-zgură atingînd valori minime după ce fluxul de aliaj lichid este reflectat spre partea inferioară a oalei.

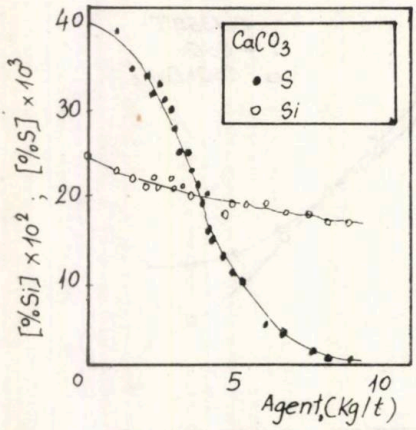


Fig. 9 — Influența cantității de carbonat de calciu asupra gradului de desulfurare

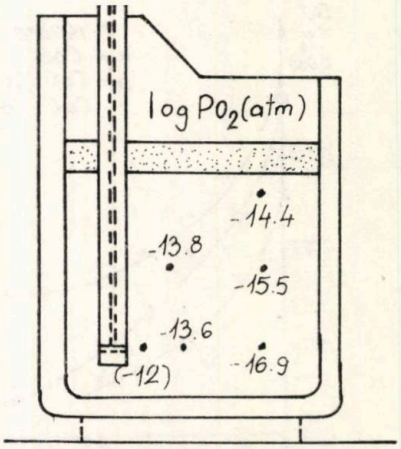


Fig. 10 — Distribuția P_{O_2} în timpul injecției pe la partea superioară a oalei

Concluzii

Tratamentul fontelor prin injecție cu Na_2CO_3 sau CaO creează condiții pentru obținerea unor conținuturi foarte scăzute de sulf și fosfor.

Injectarea de Na_2CO_3 îmbunătățește condițiile de microclimat din turnătorii putîndu-se obține grade de desulfurare de 80% și de defosforare de 90 %.

Prin tratarea fontelor cu amestecuri de CaO—Al se pot obține grade de desulfurare cu mult mai mari (circa 90%) în comparație cu cele realizate la injectarea de CaO.

BIBLIOGRAFIE

V. *Brabie, G. Neagu,* Metalurgia, 1986.
2. *S. Eketorp,* — Lectures at the Beijing University of Iron and Steel Technology. September-October 1983.
3. *T. Emi, T. IIda,* 3rd International Conference on refining of iron and steel by powder injection, 1983.
4. *H. Inoue, Y. Shigeno, M. Tokuda,* Simultaneous desulfurization 2nd International Conference on injection metallurgy.
5. *P. J. Koros,* 3rd International Conference on refining of iron and steel by powder injection.
6. *F. Leclercq, , J. P. Reboul, C. Gatellur,* 3rd International Conference on refining of iron and steel by powder injection.
7. *K. Narita, A. Tomita,* The second Japan-Sweden Symposium on ferrous metallurgy

Hot Metal Desulphurization and Dephosphorization by Injection of Na_2CO_3 and CaO

The paper shows some theoretical and practical considerations concerning the conditions of powder injection into hot metal through a submerged lance. The reaction efficiency of dephosphorization and desulphurization are shown.

C. Z.: 621.975.28

CERCETAREA PROCESULUI DE SOLIDIFICARE A CILINDRILOR DE LAMINOR PRIN UTILIZAREA MODELULUI FIZIC CU TRANSPORT DE SUBSTANȚĂ

C. BRATU L. SOFRONI*

În lucrare se prezintă rezultatele experimentale obținute în cazul solidificării cilindrilor de laminor din fontă și oțel. Se utilizează pentru cercetare un model fizic cu transport de substanță care are la bază analogia care există între legea lui Fourier de transfer de căldură și legea lui Fick de transport de masă.

Rezultatele experimentale obținute asupra timpului și vitezei de solidificare concordă cu cele prezentate în literatura de specialitate.

1. Condiții teoretice

Utilizarea proceselor de difuzie a lichidelor într-un mediu poros, pentru modelarea procesului de solidificare a cilindrilor de laminor sau lingouri, se bazează pe analogia care există între ecuația lui Fourier de transfer de căldură și ecuația lui Fick de transfer de masă (substanță).

Deci :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{1}$$

și

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{2}$$

în care : T, C — temperatura, respectiv concentrația ;

$a_T = \dfrac{\lambda}{c_p \cdot \rho}$ este coeficientul de difuzivitate termică ;

D — coeficientul de difuzie ;

λ — conductivitatea termică ;

ρ — densitatea ;

c_p — căldura specifică.

Asemănarea acestor ecuații arată clar analogia celor două fenomene : procesul de solidificare și procesul de difuzie cu transport de substanță.

---

*Șef lucrări dr. ing. ; Prof. dr. ing., catedra Turnătorie-agregate.

În plus, această asemănare a fenomenelor se bazează pe încă două observații practice.

Prima observație se referă la viteza de umezire a unei hîrtii de filtru. Astfel, dacă se ia o fișie subțire de hîrtie de filtru și se introduce cu un capăt în apă, se constată că există o linie de demarcație bine conturată între zona umedă și zona uscată.

Deplasarea liniei de demarcație a zonei umede se face după legea rădăcinii pătrate, adică după aceeași lege de deplasare a frontului de solidificare într-un cilindru sau lingou (legea lui Chvorinov).

$$X = K\sqrt{t} \tag{3}$$

în care : X este grosimea stratului solidificat ;

K — coeficientul sau constanta de solidificare ;

t — timpul.

A doua observație se referă la asemănarea dintre căldura latentă de solidificare și umiditatea remanentă în materialul poros. Astfel, dacă se pune în contact o bucată de hîrtie de filtru umezită cu o hîrtie de filtru uscată, o parte din umiditate trece din hîrtia umedă în hîrtia uscată. Repetînd operația, se constată la un moment (deși prima hîrtie continuă să rămînă umedă) că umiditatea nu mai trece în hîrtia uscată. Umiditatea rămasă în prima hîrtie este similară cu căldura latentă de solidificare (r^N). Această umiditate „remanentă" se notează prin asemănare cu r^M și este numită în literatura de specialitate [1] „umiditate de constituție".

Diferența dintre umiditatea inițială și umiditatea de constituție (caracteristică pentru fiecare pereche de hîrtie poroasă-lichid) se numește conținut specific de exces de umiditate (C) și este similară cu concentrația respectiv temperatura la transferul termic.

În literatura de specialitate [1], [2], [3] se prezintă principiile teoretice care stau la baza proiectării modelului fizic cu transport de substanță, de aceea în lucrarea de față se prezintă numai partea de rezultate experimentale referitoare la solidificarea cilindrilor de laminor turnați din oțel sau fontă cu diametrul de 1 200 mm respectiv 760 mm. Se consideră că turnarea are loc în forme metalice din fontă.

În cadrul experimentărilor s-a urmărit determinarea următorilor parametri :

— viteza de înaintare a frontului de solidificare ;

— timpul de solidificare pe diferite zone de cruste solidificate ;

— determinarea variației temperaturii fazei lichide și a fazei solide din momentul turnării pînă la solidificarea completă.

2. Instalația experimentală

În figura 1 este prezentată schema de principiu a modelului fizic cu transport de substanță utilizată la studiul procesului de solidificare.

Instalația experimentală constă dintr-un vas paralelipipedic din sticlă organică (1) pus în legătură cu un alt vas (2) cu ajutorul căruia prin

intermediul conductei flexibile (3) se poate modifica nivelul lichidului în vasul (1).

Pentru asigurarea pătrunderii lichidului în vasul (1) uniform pe toată secțiunea, vasul (1) are un al doilea fund (4) prevăzut cu perforații care are menirea să permită fixarea hîrtiei din material poros (5) pe suportul special amenajat (6).

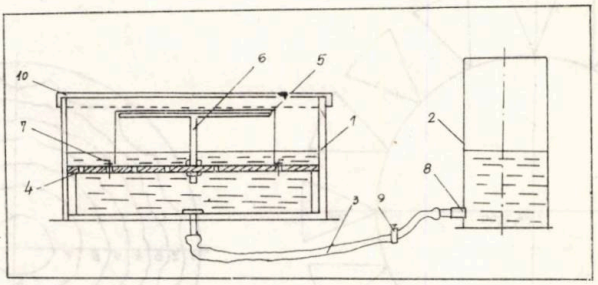


Fig. 1 — Schema modelului fizic cu transport de substanță.

Alimentarea cu lichid se face între cele două funduri prin orificiul (8).

Fixarea hîrtiei din material poros (5) pe fundul perforat se face cu ajutorul unor cîrlige (7) din sîrmă de aluminiu sau cuie. Pentru menținerea lichidului din vasul (1) la nivel constant, tubul flexibil (3) se închide cu clema (9). Deoarece lichidul din vasul (1) se poate evapora în cursul experiențelor, ceea ce ar conduce la erori de calcul din măsurători ale avansării frontului de solidificare, vasul poate fi acoperit cu capacul(10).

În modelarea procesului de solidificare prin metoda filtrării la cilindrii de laminor se fixează caracteristicile materialelor de modelare;

— apa distilată;
— soluție de bicromat de potasiu : $K_2Cr_2O_7$;
— soluție de permanganat de potasiu : $KMnO_4$;
— soluție de clorură de cupru ($CuCl_2 \cdot 2H_2O$) — 0,5 %;
— hîrtie de filtru calitativă;

pentru asigurarea egalității între cristalizarea în natură K^N și cristalizarea pe model K^M.

Se fixează materialul poros (hîrtia de filtru) prin măsurarea conținutului specific excedentar al fluidului (apa distilată) în diferite părți ale suprafeței hîrtiei de filtru,.

Conturul cilindrului în proporția aleasă se trasează (un cerc) pe hîrtia de filtru cu o linie subțire, cu creion negru. Apoi, în jurul acestui contur se desenează încă un contur, în așa fel ca distanța dintre el și conturul anterior să fie egală cu rezistența termică $\frac{1}{h}$.

Pentru menținerea aceleiași rezistențe termice $\left(\frac{1}{h}\right)$ pe tot conturul circumferinței cochilei se decupează o porțiune hașurată (la un unghi de 45°) la exteriorul modelului cilindrului.

Modelul de hîrtie de filtru este redat în figura 2.

Acest model de hîrtie se fixează pe placa model, după care se dă drumul curgerii apei distilate (soluției) din vasul (2) pînă cînd nivelul ei ajunge foarte aproape de hîrtia de filtru, după care se face o reglare a debitului de apă distilată prin intermediul clemei (9).

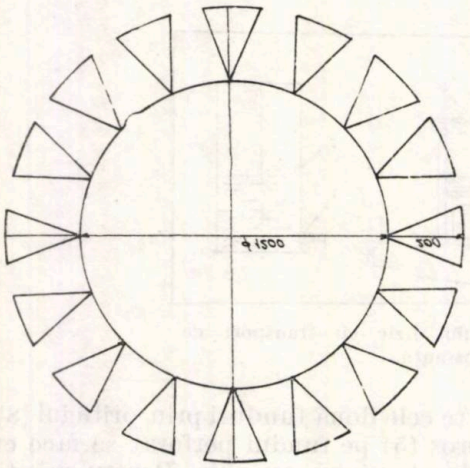


Fig. 2 — Aspectul conturului modelului de hîrtie de filtru.

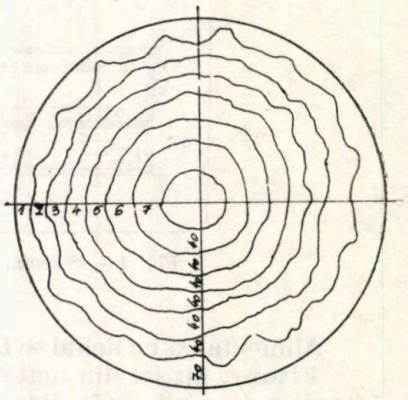


Fig. 3 — Avansarea frontului de umiditate pe model.

În momentul cînd frontul fluidului iese în conturul limitei cilindrului, se deschide cronometrul și se începe cronometrarea timpului procesului de solidificare; conturul frontului de umiditate în timpul experienței este marcat manual, cu un creion moale, după fiecare 40 secunde — de exemplu ca în figura 3.

3. Rezultate experimentale

Relațiile utilizate sînt cele din lucrările [1] și [2].

— determinarea criteriului geometric (m_x) se face cu relația :

$$m_x = \frac{\tilde{X}^N}{\tilde{X}^M} \tag{4}$$

în care : $\tilde{X}^N$ este raza cilindrului în natură;

$\tilde{X}^M$ — raza cilindrului pe model.

Avem :

$\tilde{X}^N_{\text{oțel}} = 600$ mm ; $\tilde{X}^N_{\text{fontă}} = 380$ mm

$\tilde{X}^M_{\text{oțel}} = 40$ mm ; $\tilde{X}^M_{\text{fontă}} = 38$ mm.

Rezultă : $m_{x\ \text{oțel}} = 15$; $m_{x\ \text{fontă}} = 10$.

— *Calculul rezistenței termice*

Rezistența termică $\left(\frac{1}{h^M}\right)$ se calculează cu relația :

$$\frac{1}{h^M} = \frac{1}{m_x} \cdot \frac{\widetilde{X}^N}{\mathrm{Bi}} \tag{5}$$

Rezistența termică pe model pentru valori a criteriului Biot, în cazul cilindrului din oțel pentru $m_x = 15$ și a cilindrului din fontă pentru $m_x = 10$, este dată în tabelul 1.

Tabelul 1

Valorile rezistenței termice pe model

Criteriul Biot	15	10	5	2	1	0,5
Rezistența termică ($1/h^M$) pentru oțel	0,00265	0,004	0,008	0,02	0,04	0,08
Rezistența termică ($1/h^M$) pentru fontă	0,0025	0,0038	0,0076	0,019	0,038	0,076

— *Calculul conținutului specific de umiditate*

Conținutul specific de umiditate se calculează cu relația :

$$r^M = \frac{g_2 - g_1}{2} \ (\mathrm{g/cm^2}) \tag{6}$$

O bucată de hîrtie de filtru calitativă cu suprafața de 2 cm² se cîntărește într-o fiolă cu o precizie de 10^{-2} grame, după care se scufundă în soluție timp de 30 secunde. Se pune în contact cu bucăți de hîrtie uscată pentru ca excesul de umiditate să treacă în hîrtia uscată ; se repetă operația pînă ce prin hîrtia uscată nu mai trece umiditate. Se cîntărește din nou prima bucată iar conținutul specific de umiditate se calculează cu relația (6) unde g_1 și g_2 sînt cele două citiri de greutăți pentru hîrtia de filtru uscată și respectiv umedă. Rezultatele sînt prezentate în tabelul 2, pentru diferite soluții utilizate.

Tabelul 2

Valorile conținutului specific de umiditate

Soluția	Apă distilată	Soluție saturată de $K_2Cr_2O_7$	Soluție de $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ — 0,5 %
r^M, g/cm²	0,0083	0,0035	0,0065

— *Calculul criteriului de cristalizare în natură*

Criteriul de cristalizare în natură (K^N) se determină cu relaţia :

$$K^N = \frac{r^N}{c_p(T_{max} - T_{min})} \tag{7}$$

şi reprezintă raportul dintre căldura latentă de solidificare (r^N) şi căldura necesară pentru încălzire de la T_{min} la T_{max}.

Proprietăţile termofizice luate în considerare în calcul sînt prezentate în tabelul 3.

Tabelul 3

Proprietăţile termofizice pentru oţel şi fontă

Materialul	T_L, K	T_s, K	L, $\frac{KJ}{kg}$	c, $\frac{J}{kg \cdot K}$	λ, $\frac{W}{m.\ k}$	ϱ, $\frac{kg}{m^3}$
Oţel	1780	1753	258	600	45	7500
Fontă	1483	1473	270	550	25,5	7200

Conform relaţiei (7) rezultă următoarele valori :

$$K^N_{oţel} = \frac{258 \cdot 10^3}{600(1480 - 100)} = 0{,}31$$

$$K^N_{fontă} = \frac{270 \cdot 10^3}{550(1200 - 100)} = 0{,}44$$

2. *Determinarea criteriului de cristalizare pe model (K^M) şi a conţinutului maxim de umiditate*

Conţinutul maxim de umiditate (C_{max}) se determină cu relaţia :

$$K^M = \frac{r'^M}{C_{max}} \tag{8}$$

Rezultă :

$$C_{max} = \frac{r'^M}{K^M}$$

unde : $r'^M = \frac{r^M}{h}$

în care : $r^M = 0{,}0083$ g/cm² este conţinutul specific de umiditate pentru apă distilată ;

h — grosimea hîrtiei de filtru : $h = 0{,}041$ cm.

Deci : $r'^{M} = 0{,}20$ g/cm³ și rezultă :

$$C_{max} = \frac{0{,}20}{K^{M}} \tag{9}$$

Ținînd seama că și coeficientul de difuzie se modifică cu distanța de la margine, modelul s-a împărțit în cinci zone corespunzătoare zonelor (fig. 4) pentru care s-au determinat caracteristicile de modelare (tabelul 4).

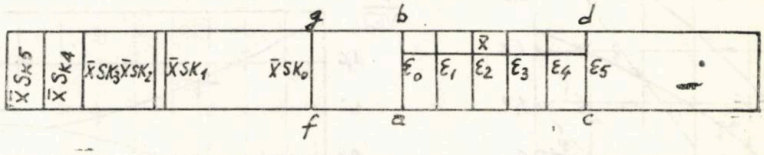


Fig. 4 — Hîrtie de filtru pentru determinarea coeficientului de umidității.

Valorile obținute pentru $M = 3$ și $Bi = 2$ sînt date în tabelul 4.

Tabelul 4

Valorile caracteristicilor materialelor de modelare

Indice	$1/h^{M}$, [m]		Fo_i	ξ_i	Sk_i	$\widetilde{X}_i \cdot Sk_i$, [m]		$\varepsilon_i \cdot Fo_i$, [m]
	oțel	fontă				oțel	fontă	
1	0,02	0,019	0,4	0,20	2,35	0,094	0,089	0,0032
2	0,02	0,019	0,85	0,40	2,80	0,112	0,106	0,0068
3	0,02	0,019	1,4	0,60	3,10	0,124	0,118	0,0112
4	0,02	0,019	2	0,80	3,45	0,138	0,131	0,016
5	0,02	0,019	2,7	1,00	3,75	0,15	0,142	0,0216

Calculele s-au făcut pentru $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon = 0{,}008$ m și respectiv $\tau_1 = 40$ s ; $\tau_2 = 55$ s ; $\tau_3 = 160$ s ; $\tau_4 = 280$ s ; $\tau_5 = 570$ s.

Criteriul Fourier (Fo) și Stark (Sk) se iau din graficul prezentat în figura 5.

Pentru determinarea criteriului de cristalizare pe model (K^{M}) se utilizează diagrama din figura 6.

Coeficientul de difuzie (a_D^{M}) și coeficientul de pătrundere (βi^{M}) pe model se determină cu relațiile :

$$a_D^{M} = \frac{Fo_i}{\tau_i}(\widetilde{X}^{M})^2 \tag{10}$$

$$\beta i^{M} = \frac{\varepsilon_i^{M}}{\sqrt{\tau_i^{M}}} \tag{11}$$

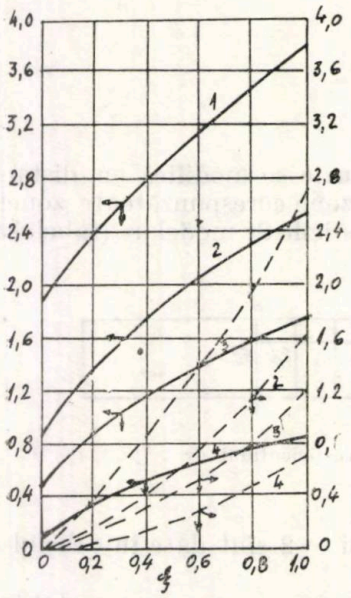


Fig. 5 — Variația grosimii adimensionale (ξ) a stratului solidificat în funcție de timpul adimensional (Fo) și criteriul Stark (Sk) pentru diferite valori ale parametrului adimensional.
curba 1 — apă distilată; curba 2 — soluție de $Cr_2K_2O_4$; curba 3 — soluție de $KMnO_4$; curba 4 — soluție $CuCl_2H_2O$ — 0,5 %.

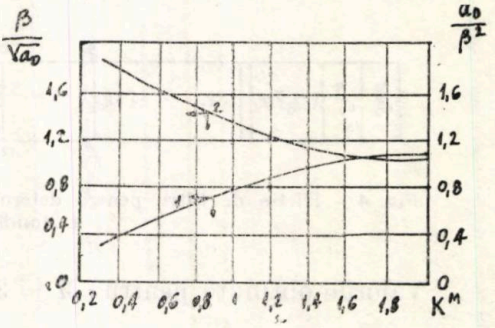


Fig. 6 — Relația dintre criteriul de cristalizare pe model (K^M) și raportul $\frac{\beta}{\sqrt{a_D}}$ (curba 1) și respectiv $\frac{a_D}{\beta^2}$ (curba 2).

Valorile obținute sînt prezentate în tabelul 5.

Valorile $\frac{\beta}{\sqrt{a_D}}$ se găsesc în tabelul 6, iar valorile K^M s-au determinat de pe curba 1 din figura 6.

Tabelul 5

Valorile coeficientului de pătrundere și a coeficientului de difuzie

Perechea	Soluția	Indice „i"	β^M [m · s$^{-1/2}$]	a_D^M [m^2 · s^{-1}]	K^M
I	Apă distilată	1	$1,269 \cdot 10^{-2}$	$16 \cdot 10^{-6}$	0,3
		2	$1,081 \cdot 10^{-3}$	$25 \cdot 10^{-6}$	0,25
		3	$0,63 \cdot 10^{-3}$	14.10^{-6}	0,19
		4	$0,47 \cdot 10^{-3}$	$11 \cdot 10^{-6}$	0,15
		5	$0,33 \cdot 10^{-3}$	$7,5 \cdot 10^{-6}$	0,1

Tabelul 6

Valorile criteriului de cristalizare pe model în cazul modelării cilindrului din oţel

Indice	1	2	3	4	5
$\beta/\sqrt{a_D}$	0,317	0,216	0,17	0,142	0,120
K^M	0,3	0,25	0,19	0,15	0,1

Calculul conţinutului maxim de umiditate (C_{max}) referitor la modelarea cilindrului de oţel se face pentru fiecare zonă cunoscînd coeficientul K^M cu relaţia 9 iar valorile sînt prezentate în tabelul 7.

Tabelul 7

Valorile conţinutului maxim de umiditate în cazul modelării cilindrului din oţel

Zona	1	2	3	4	5
C_{max}	0,66	0,8	1,05	1,33	2

Analog, pentru determinarea coeficientului de difuzie (a_D), a criteriului de cristalizare pe model (K^M) precum şi pentru determinarea conţinutului maxim de umiditate (C_{max}), se fac aceleaşi calcule pentru cilindrul de laminor din fontă. Valorile obţinute sînt prezentate în tabelul 8.

Tabelul 8

Valorile criteriului de cristalizare pe model şi a conţinutului max m de umid ate în cazul modelării cilindrului din fontă

Zona	1	2	3	4	5
a_D^M, $[m^2 \cdot s^{-1}]$	$14 \cdot 10^{-6}$	$22 \cdot 10^{-6}$	$12 \cdot 10^{-6}$	$10 \cdot 10^{-6}$	$6,8 \cdot 10^{-6}$
$\beta/\sqrt{a_D}$	0,33	0,23	0,128	0,148	0,126
K^M	0,31	0,27	0,2	0,17	0,12
C_{max}	0,64	0,74	1	1,176	1,66

— *Determinarea criteriului de similitudine pentru timp* (m_τ)

Valoarea criteriului m_τ se determină cu relaţia :

$$m_\tau = m_x^2 \cdot \frac{a_D^M}{a_T^N}; \quad a_T^N = \frac{\lambda}{\rho \cdot c}. \tag{12}$$

Rezultă :

$$a_{T\ \text{oțel}}^{N} = \frac{45}{7\,500 \cdot 600} = 10 \cdot 10^{-6}\ \text{m}^2/\text{s}$$

$$a_{T\ \text{fontă}}^{N} = \frac{25{,}5}{7\,200 \cdot 350} = 6{,}4 \cdot 10^{-6}\ \text{m}^2/\text{s}.$$

Datele obținute pentru m_τ sînt prezentate în tabelul 9.

Tabelul 9

Valori criteriului de similitudine pentru tim p

Zona		1	2	3	4	5
m_τ	Oțel	64	100	56	44	30
	Fontă	14	22	12	10	6,8

Înaintarea frontului de umiditate este marcată din 40 în 40 secunde.

Se va întocmi tabelul 10 cu datele privind grosimea crustei solidificate, în cazul utilizării apei distilate ca lichid de filtrare.

Tabelul 10

Grosimea crustei solidificate

Indice	Zona	Grosimea crustei radiale, în mm			
		model		cilindru	
		oțel	fontă	oțel	fontă
1	1	(4)	(4)	60	38
	2	(8)	(7)	120	76
2	3	(12)	(11)	180	114
	4	(16)	(15)	240	152
3	5	(20)	(19)	300	190
	6	(24)	(23)	360	228
4	7	(28)	(27)	420	266
	8	(32)	(31)	480	302
5	9	(36)	(34)	540	342
	10	(40)	(38)	600	380

Folosind pentru timp criteriul de asemănare se pot determina pentru fiecare grosime solidificată duratele de solidificare în natură cu relaţia :

$$\tau^N = m_\tau \cdot \tau^M \qquad (13)$$

Folosind criteriile de asemănare pentru timp din tabelul 9 se pot obţine duratele de solidificare ale diferitelor zone din natură, care sînt prezentate în tabelul 11.

Cu datele din tabelul 11 se trasează graficul din figura 7.

Tabelu l 11

Valorile duratelor de solidificare pe diferite zone ale cilindrului din oţel respectiv fontă

Indice	Zona	$\tau^N = m_\tau \cdot \tau^M$, (min) OTEL	$\tau^N = m_\tau \cdot \tau^M$, (min) FONTA
1	1	$64 \cdot 0,66 = 42,24$	$14 \cdot 0,66 = 9,24$
	2	$64 \cdot 0,66 + 42,24 = 84,48$	$14 \cdot 0,66 + 9,24 = 18,48$
2	3	$100 \cdot 0,66 + 84,48 = 150,48$	$22 \cdot 0,66 + 18,48 = 37,00$
	4	$100 \cdot 0,66 + 150,48 = 216,48$	$22 \cdot 0,66 + 37 = 54,52$
3	5	$44 \cdot 0,66 + 216,48 = 253,44$	$12 \cdot 0,66 + 54,52 = 64,44$
	6	$44 \cdot 0,66 + 253,44 = 290,4$	$12 \cdot 0,66 + 64,44 = 73,36$
4	7	$56 \cdot 0,66 + 290 \cdot 4 = 319,44$	$10 \cdot 0,66 + 73,36 = 97,7$
	8	$56 \cdot 0,66 + 319,4 = 348,48$	$10 \cdot 0,66 + 97,7 = 102,05$
5	9	$30 \cdot 0,66 + 348,48 = 368,28$	$6,8 \cdot 0,66 + 102,05 = 130,52$
	10	$30 \cdot 0,66 + 368,28 = 388,08$	$6,8 \cdot 0,66 + 130,52 = 151,5$

* Timpul de solidificare pentru cilindrul din oţel cu diametrul de 1 200 mm este de 388,08 min = 6,4 7h, iar cilindrul din fontă cu diametrul de 720 mm este de 151,5 min = = 2,51 h

Concluzii

Modelul fizic cu transport de substanţă oferă posibilitatea să se studieze cu uşurinţă cinetica procesului de solidificare a pieselor cu configuraţie geometrică simplă cum sînt : cilindrii de laminor şi lingourile turnate din aliaje feroase.

În cazul modelării solidificării cilindrilor de laminor din oţel şi fontă rezultatele nu diferă mult de cele prezentate în literatura de specialitate.

În cazul experimentărilor s-au constatat şi alte fenomene, care sînt confirmate de literatura de specialitate, ca de exemplu :

— viteza de avansare a frontului de solidificare variază pe secţiunea cilindrului ;

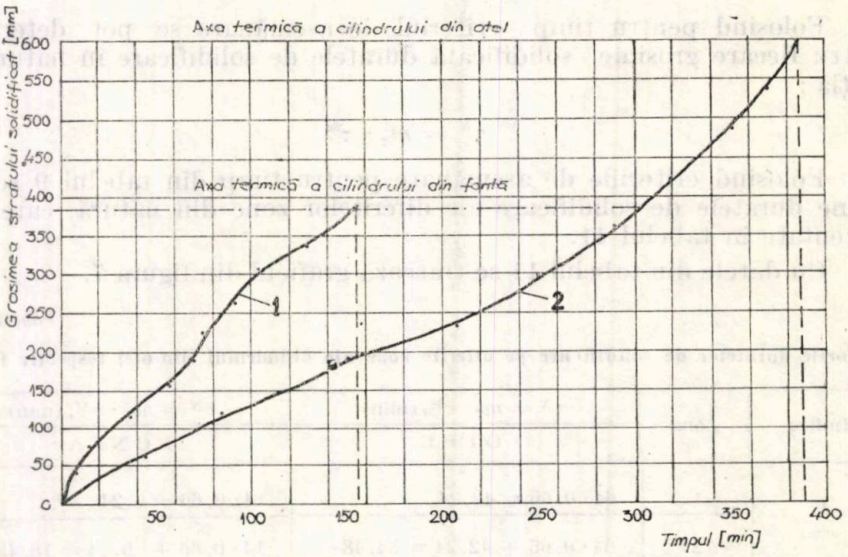


Fig. 7 — Variația grosimii stratului solidificat în funcție de timp : 1 — cilindru din fontă ; 2 — cilindru din oțel.

— datorită variației coeficientului de solidificare de-a lungul razei cilindrului se constată și o variație a grosimii stratului solidificat ;
— la începutul procesului viteza de avansare a frontului de solidificare este mare, după care apoi scade spre centrul lingoului, creîndu-se condiții pentru apariția unui număr mare de centre de cristalizare, fapt care accelerează solidificarea.

Modelul fizic cu transport de substanță este ușor de realizat practic și adaptabil la diferite condiții de solidificare (solidificare în forme metalice sau în forme din amestec).

BIBLIOGRAFIE

1. *N. A. Iodko, V. S. Sklear,* , Modelirovanie teplovîh proțessov v metallurghii. Metallurghizdat, Moscova, 1967.
2. *I. Tripsa, S. Vacu, E. Verceanu,* Metodă de studiere a cineticii procesului de solidificare a lingourilor pe modele cu transport de substanță, Studii și cercetări de metalurgice, Institutul Politehnic București, Facultatea de Metalurgie, p. 89—103.
3. *E. Bratu,* Operații și utilaje în industria chimică, vol. II, Ed. tehnică, București, 1970, p. 611—620.

Research of the Solidification Process of Mill Cylinders with the Help of a Physical Model with Substance Transport

The paper presents the experimental results obtained for the solidification of cast iron and steel mill cylinders. The research was carried out using a physical model with substance transport based on the analogy existing between Fourier's Law of heat transfer and Fick's Law of mass transport.

The experimental results obtained for the time and speed of solidification are in accordance with those presented in the literature of the field.

C. Z.: 621.796 : 662.31

DETERMINAREA PRESIUNILOR EXERCITATE DE MATERIALELE PULVERULENTE ȘI GRANULARE ASUPRA PEREȚILOR BUNCĂRELOR CILINDRICE ȘI PRISMATICE

GH. I. ENE*

În lucrare se prezintă o m odalitate de determinare a presiunii exercitate de materiale pulverulente și gr anulare asupra pereților buncărelor în care sînt depozitate.

Cunoașterea variației și a mărimii acestei presiuni este necesară pentru a realiza calculul de rezistență a diferitelor elemente componente ale buncărului.

1. Generalități

În diferite industrii (chimică, a materialelor de construcții, alimentară, metalurgică etc.) se utilizează pentru depozitarea materialelor pulverulente și granulare, în cadrul liniilor tehnologice, instalații de depozitare : buncăre și silozuri. Denumirea de buncăr sau de siloz este convențională. Se utilizează de obicei denumirea de buncăr pentru instalațiile de depozitare pentru care $h/d \leqslant 1{,}5 \ldots 2{,}0$ [1] (unde h este înălțimea, iar d — diametrul echivalent al secțiunii transversale), iar cea de siloz, pentru instalațiile de depozitare pentru care $h/d > 1{,}5 \ldots 2{,}0$. În cele ce urmează se va utiliza denumirea generică de buncăr.

Buncărele sînt formate dintr-un corp cilindric sau prismatic, realizat de obicei din tablă de oțel sau beton armat, prevăzut la partea inferioară, pentru ușurarea evacuării materialului, cu un fund sub forma unui trunchi de con sau de piramidă. Buncărele sînt prevăzute, de asemenea, cu unele dispozitive auxiliare, cum sînt dispozitivele de închidere, dispozitivele de extracție a materialului etc.

2. Stabilirea presiunii pe care materialul (pulverulent sau granular) o exercită asupra pereților și fundului buncărului

Într-un masiv de material granular presiunile care acționează după direcțiile verticală și orizontală au respectiv expresiile [1,2,3]

$$p_V = \rho g z \tag{1}$$

$$p_H = n \rho g z \tag{2}$$

* Șef lucrări dr. ing., catedra de Utilaj tehnologic-chimic

în care ρ este masa volumică a materialului (densitatea aparentă); g — acceleraţia gravitaţiei; z — adîncimea (profunzimea) la care este plasat punctul considerat; n — coeficientul transmiterii presiunii (coeficientul presiunii laterale).

Presiunea pe o suprafaţă înclinată cu unghiul α faţă de planul orizontal este [1, 2, 3] (v. fig. 3).

$$p = \rho g z (\cos^2\alpha + n \sin^2 \alpha) \tag{3}$$

Pentru coeficientul presiunii laterale, n, se consideră de obicei valoarea raportului dintre tensiunile normale principale (maximă corespunzătoare stării de echilibru limită (stare prin depăşirea căreia se produce „dislocarea", „surparea" materialului), care se numeşte coeficient de mobilitate şi care se determină cu relaţia [1,2,3,4]

$$m = \frac{1 - \sin \varphi}{1 + \sin \varphi}, \tag{4}$$

unde φ este unghiul frecării interne a materialului.

Fenomenele care apar în buncăre sînt însă mult mai complicate şi, prin urmare, mai dificil de descris matematic. În timpul umplerii buncărului cu material are loc o deplasare de sus în jos a structurilor de material plasate în profunzime sub acţiunea greutăţii straturilor superioare (îndesarea materialului). Totodată, datorită frecării dintre material şi peretele buncărului, particulele aflate în apropierea peretelui se deplasează mai greu în lungul acestuia şi, ca atare, un strat orizontal plan considerat în masa materialului,se deformează, căpătînd o formă concavă, iar presiunea verticală se distribuie neuniform pe secţiunea transversală a buncărului, avînd valoarea minimă în apropierea peretelui şi valoarea maximă pe axa buncărului [1].

În aceste condiţii determinarea presiunii exercitate de material pe pereţii şi fundul buncărelor este mai dificilă. În literatura de specialitate este utilizată frecvent, pentru determinarea presiunii verticale, relaţia lui Janssen [1,2,3,4,5] stabilită în ipoteza că presiunea verticală se distribuie uniform pe secţiunea transversală a buncărului şi că materialul din buncăr nu se îndeasă):

$$p_v = \frac{\rho g R}{f_1 n}\left[1 - \exp\left(-\frac{f_1 n z}{R}\right)\right] \tag{5}$$

unde , în afara notaţiilor utilizate anterior, f_1 este coeficientul de frecare dintre material şi perete (coeficientul de frecare externă); R — raza hidraulică (raportul dintre aria secţiunii transversale a buncărului şi perimetrul acesteia).

Relaţia (5) reflectă faptul că o parte din greutatea materialului din buncăr este preluată, prin frecare, de către pereţii acestuia (v. şi fig. 1). Se observă că, sporind adîncimea z se atenuează creşterea presiunii p_v; pentru $z \to \infty$, presiunea tinzînd la valoarea limită

$$p_{v\,\max} = \frac{\rho g R}{f_1 n} \tag{6}$$

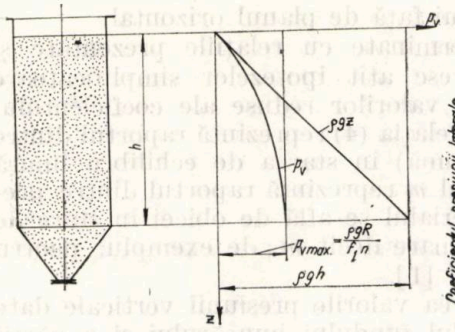


Fig. 1—Variația presiunii verticale în buncăr

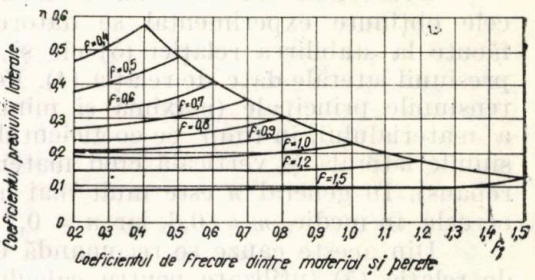


Fig. 2—Grafic pentru determinarea coeficientului presiunii laterale

Pentru a înlesni utilizarea relației (5), aceasta poate fi scrisă sub forma simplă

$$p = a \rho g z \tag{7}$$

unde

$$a = \frac{1}{b}[1 - \exp(-b)] \tag{8}$$

în care

$$b = \frac{f_1 n z}{R} \tag{9}$$

Valorile coeficientului a (numit și coeficient de „agățare", care arată că o parte din greutatea materialului este preluată, prin frecare, de către pereții buncărului) sînt prezentate, în funcție de valorile mărimii b, în tabelul 1.

Tabelul 1

b	a	b	a	b	a	b	a
0,00	1,00	0,55	0,769	1,20	0,582	2,75	0,340
0,05	0,975	0,60	0,752	1,30	0,560	3,00	0,318
0,10	0,950	0,65	0,735	1,40	0,538	3,50	0,276
0,15	0,928	0,70	0,719	1,50	0,518	4,00	0,248
0,20	0,906	0,75	0,703	1,60	0,499	4,50	0,219
0,25	0,885	0,80	0,688	1,70	0,481	5,00	0,198
0,30	0,864	0,85	0,673	1,80	0,463	6,00	0,167
0,35	0,844	0,90	0,659	1,90	0,447	7,00	0,142
0,40	0,824	0,95	0,645	2,00	0,432	8,00	0,125
0,45	0,905	1,00	0,632	2,25	0,397	9,00	0,111
0,50	0,786	1,10	0,606	2,55	0,367	10,00	0,100

Presiunea pe pereții verticali ai buncărului (presiunea laterală) se determină cu relația :

$$p_H = p_v \cdot n, \tag{10}$$

iar pe pereții înclinați, cu relația :

$$p_\alpha = p_v(\cos^2 \alpha + n \sin^2 \alpha), \tag{11}$$

α fiind unghiul de înclinare a peretelui față de planul orizontal.

Deosebirile dintre valorile determinate cu relațiile prezentate și cele obținute experimental se datoresc atît ipotezelor simplificatoare făcute la stabilirea relației (5) cît și valorilor reduse ale coeficientului presiunii laterale date de relația (4). Relația (4) reprezintă raportul dintre tensiunile principale (maximă și minimă) în starea de echilibru limită a materialului, în timp ce coeficientul m reprezintă raportul dintre presiunile laterală și verticală cînd materialul se află de obicei în stare de repaus). În general n este mult mai mare decît m; de exemplu, pentru cereale, în medie, $m = 0{,}3$, iar $n = 0{,}7$ [1].

Din aceste cauze se recomandă ca valorile presiunii verticale date de relația (5) (utilizate pentru calculul fundului buncărului și a părții inferioare a pereților verticali, egală cu 2/3 din înălțimea lor) să fie multiplicate cu un coeficient de corecție $k_c = 2$ [1].

Pentru coeficientul presiunii laterale lucrarea [2] recomandă să se utilizeze pentru buncăre puțin adînci ($h/d < 1$) valorile date de relația :

$$m \approx 0{,}18/f \tag{12}$$

unde f este coeficientul frecării interne.

În cazul buncărelor adînci (silozuri), atunci cînd valorile coeficientului de frecare dintre material și perete f_1 sînt reduse, se recomandă, de asemenea, determinarea coeficientului presiunii laterale cu relațiile (4) sau (12). Cînd valorile coeficientului de frecare dintre material și perete f_1 sînt apropiate de cele ale coeficientului frecării interne f, coeficientul presiunii laterale este mult mai mare decît cel de mobilitate și, în acest caz, valorile lui se determină utilizînd graficul din figura 2 [2].

În cazul în care suprafața liberă a materialului nu este plană ci conică, în relațiile (5), (7) și (9) mărimea z se va înlocui cu mărimea [2] (fig. 3) :

$$z' = z + z_0 = z + \frac{d \operatorname{tg} \alpha_t}{6} \tag{13}$$

unde α_t este unghiul taluzului natural al materialului care, pentru materialele granulare care curg ușor (nisip uscat, cereale etc.), poate fi considerat egal cu unghiul frecării interne φ, ($\alpha_t \approx \varphi$).

Presiunea exercitată de material pe pereții buncărelor crește în prezența solicitărilor dinamice (vibrații, trepidații, alimentarea buncărului direct din mijlocul de transport, prăbușirea bolților etc.). Din această cauză se recomandă ca presiunea determinată cu relația (5) să fie multiplicată cu un coeficient dinamic care are valorile : $k_d = 1{,}1 \ldots 1{,}2$ atunci cînd fundația buncărului este supusă la trepidații, $k_d = 1{,}1 \ldots 1{,}4$, atunci cînd buncărul este alimentat de la înălțime mare direct din mijlocul de transport ; $k_d = 1{,}3 \ldots 1{,}5$, atunci cînd buncărul este prevăzut cu vibratoare pentru înlesnirea scurgerii materialului din buncăr ; $k_d = 1{,}6$, pentru buncăre transportabile [2].

Cele prezentate sînt valabile atît pentru buncăre cilindrice cît și pentru buncăre prismatice, pentru materiale care curg ușor (cereale, nisip uscat etc.).

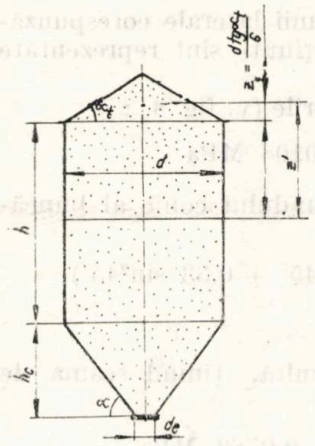


Fig. 3 — Schemă pentru precizarea dimensiunilor buncărului

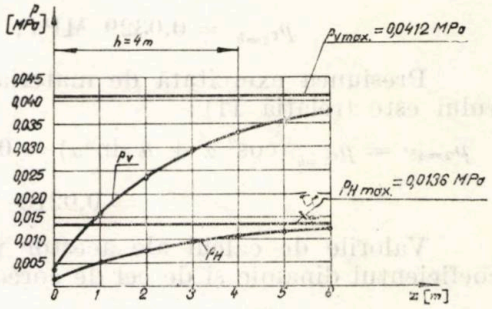


Fig. 4 — Variația presiunii verticale și a celei laterale în funcție de adîncimea buncărului z

3. Exemplu de calcul

Se consideră un buncăr cilindric caracterizat prin următoarele elemente (v. fig. 3) : $d = 2{,}00$ m ; $h = 4{,}00$ m ; $h_c = 0{,}90$ m ; $d_e = 0{,}20$ m ; $\alpha = 45°$; volumul $V = 14{,}34$ m^3. Materialul conținut în buncăr este nisip uscat cu granulația 1,0...2,0 mm, caracterizat prin următoarele mărimi : $\rho = 1\,600$ kg/m^3 ; $\varphi = 35°$; $\varphi_1 = 30°$; $\alpha_t = 35°$.

Pentru determinarea presiunilor de calcul se consideră coeficientul dinamic $k_d = 1{,}2$ și cel de corecție $k_c = 2$. Coeficienții frecării interne și externe sînt respectiv $f = \operatorname{tg} 35° = 0{,}700$; $f_1 = \operatorname{tg} 30° = 0{,}577$.

Coeficientul de mobilitate are valoarea :

$$m = \frac{1 - \sin 35°}{1 + \sin 35°} = 0{,}271$$

Deoarece coeficienții frecării interne și externe au valori apropiate iar buncărul este adînc $h/d = 2 > 1$, coeficientul presiunii laterale va avea o valoare mult diferită de a celui de mobilitate. Într-adevăr din figura 2 rezultă $n = 0{,}33$. Abaterea dintre valorile mărimilor n și m este de aproximativ 22%.

Raza hidraulică (secțiune circulară) este

$$R = d/4 = 2/4 = 0{,}5 \text{ m}.$$

Mărimea z_0 (fig. 3) are valoarea :

$$z_0 = \frac{d \operatorname{tg} \alpha_t}{6} = \frac{2.\operatorname{tg} 35°}{6} = 0{,}233 \text{ m}$$

Presiunea verticală se calculează cu relația

$$p_v = \frac{\rho g R}{f_1 n}[1 - 1 \exp\ (-f_1 n z'/R)]$$

unde $z' = z_0 + z$; $z \in [0, h]$

Pentru diferite valori ale lui z au rezultat valorile reprezentate grafic în figura 4.

S-au calculat cu relaţia (10) valorile presiunii laterale corespunzătoare diferitelor valori ale lui z. Rezultatele obţinute sînt reprezentate grafic în figura 4.

La adîncimea $z = h = 4$ m au rezultat valorile (v. fig. 4) :

$$p_{v_{z=h}} = 0{,}0329 \text{ MPa}; \quad p_{H_{z=h}} = 0{,}0108 \text{ MPa}.$$

Presiunea exercitată de material asupra fundului conic al buncărului este (relaţia 11) :

$$p_{\alpha=45^\circ} = p_{v_{z=h}} (\cos^2 \alpha + n \sin^2\alpha) = 0{,}0329 \ (\cos^2 45^\circ + 0{,}33 \ \sin^2 45^\circ) =$$

$$= 0{,}0218 \text{ MPa}.$$

Valorile de calcul ale acestor presiuni rezultă, ţinînd seama de coeficientul dinamic şi de cel de corecţie :

$$p_{v\text{calc}} = k_d \cdot k_c \cdot p_{v_{z=h}} = 1{,}2 \cdot 2 \cdot 0{,}0329 = 0{,}0789 \text{ MPa}$$

$$p_{H\text{aalc}} = k_d \cdot k_c \cdot p_{H_{z=h}} = 1{,}2 \cdot 2 \cdot 0{,}0108 = 0{,}0259 \text{ MPa}$$

$$p_{\alpha\text{ calc}} = k_d \cdot k_c \cdot p_{\alpha=45^\circ} = 1{,}2 \cdot 2 \cdot 0{,}0218 = 0{,}0523 \text{ MPa}$$

4. Concluzii

Mediile pulverulente şi granulare se comportă diferit atît faţă de mediile solide cît şi faţă de cele lichide. Presiunea exercitată de aceste materiale pe pereţii recipientelor în care sînt depozitate creşte exponenţial cu adîncimea buncărului tinzînd asimptotic către o valoare limită atunci cînd adîncimea creşte foarte mult. Valorile maxime ale presiunilor apar deci la baza buncărului. Cunoaşterea modului de variaţie a presiunilor exercitate de material asupra pereţilor buncărului este necesară pentru realizarea calculului de rezistenţă a elementelor componente ale acestuia (corp, fund, închizător). Pentru buncărele cilindrice se poate utiliza, pentru calculul de rezistenţă, teoria învelişurilor de revoluţie supuse la presiune interioară, încărcarea fiind axial simetrică.

BIBLIOGRAFIE

1. *G. K. Klein*, Stroitelnaia mehanika sîpucih tel, Izd. Stroizdat, Moskva, 1977, p. 26—39 şi 217—230.
2 *K. V. Alferov, R. L. Zenkov*, Bunkernie ustanovki, Izd. Maşghiz, Moskva, 1955, p. 33—42 şi 86—91
3. *H. Segal, C. Linde, I. Purcariu*, Maşini de ridicat şi de transportat, Editura tehnică, Bucureşti, 1960, p. 567—580.
4. *R. L. Zenkov*, Mehanika nasipnîh gruzov, Izd. Maşinostroenie, Moskva, 1964, p. 131—140.
5 *D. Arnold*, Aufbereitungs-Technik, 13, Nr. 4, 1972, p. 232—237.

The Determination of the Powder and Granular Materials Pressure to the Cylindrical and Prismatical Walls of the Bunkers

In this paper a method of the determination of the powder and granular materials pressure of the bunkers walls, where these materials are stored, is presented.

The knowledge of the variation way of these pressures and of their size is necessary for getting the strength calculation of the bunker different elements.

C. Z.: 66.023.3.001.24

ECUAȚIILE CARACTERISTICE ALE REACTOARELOR BIOCHIMICE IDEALE CONTINUE

V. LAVRIC, O. MUNTEAN*

Pe baza ecuațiilor de bilanț masic total și parțial, se deduc ecuațiile caracteristice reactoarelor biochimice ideale izoterme. Prin compararea performanțelor bioreactoarelor ideale, se determină influența circulației asupra procesului biochimic pentru o viteză a procesului de creștere a biomasei descrisă de o expresie Monod.

1. Introducere

Dezvoltarea deosebită, în ultimii ani, a tehnologiilor biochimice, a impus necesitatea descrierii cantitative, cît mai aproape de realitate, a reactorului biochimic, aparat avînd multe caracteristici comune reactorului chimic, dar deosebit de acesta prin prezența microorganismelor, sau a enzimelor și prin necesitatea respectării, în anumite situații, a unor condiții speciale de operare, cum sînt, de exemplu, condițiile aseptice.

Descrierea comportării reactorului poate fi făcută cu ajutorul ecuațiilor de bilanț în care caz este necesară caracterizarea cît mai exactă a circulației mediului biologic. Fazele prezente în bioreactor, lichidă, solidă și gazoasă (cazul proceselor biochimice aerobe), au o circulație complexă care nu poate fi decît modelată. Construirea unor modele de circulație, cu posibilități de apropiere treptată de realitate, poate fi realizată prin metoda conexiunii de zone cu circulație bine definită (R — recirculație ideală; D — deplasare ideală; serie R etc.) și introducerea eventuală a zonelor stagnante, a scurtcircuitelor, a recirculărilor exterioare, etc. [1].

Performanța reactorului descris printr-un asemenea model rezultă, astfel, din rezolvarea ecuațiilor caracteristice fiecărei zone componente, scrisă pentru condițiile specifice.

Dintre bioreactoarele avînd o circulație bine definită, de un interes aparte s-a bucurat cel cu recirculație ideală, în regim staționar. Humphrey [2], Aiba [3] și alții au determinat ecuația caracteristică a acestui reactor, precum și a unei serii de reactoare, dar nu s-au referit la importanța circulației asupra performanței reactorului.

* Asist. ing., Șef lucrări dr. ing., catedra Inginerie chimică

Lucrarea de faţă îşi propune să deducă şi să sistematizeze, utilizînd metodele dezvoltate la reactorul chimic, ecuaţiile reactoarelor biochimice cu circulaţie bine definită, numite, în continuare, ecuaţii caracteristice. Pentru o cinetică biochimică dată, performanţele reactoarelor ideale sînt comparate pentru a evidenţia influenţa circulaţiei asupra transformării din reactor.

Lista de notaţii

D	— viteza de diluţie	h^{-1}
D_{V_0}	— debit volumetric de alimentare	m^3/h
K_s	— constanta de saturaţie	kg/m^3
S	— concentraţia de substrat în reactor	kg/m^3
S_0	— concentraţia de substrat în alimentare	kg/m^3
t_0	— durata nominală	h
V	— volumul masei de reacţie	m^3
v_{RX}	— viteza de creştere a biomasei	kg/m^3 h
v_{RS}	— viteza de consum a substratului	$kg/m^3.h$
X	— concentraţia de biomasă în reactor	kg/m^3
X_0	— concentraţia de biomasă în alimentare	kg/m^3
Y	— randamentul de transformare a substratului în biomasă	kg/kg
μ	— viteza specifică de creştere a biomasei	h^{-1}
μ_{max}	— viteza specifică maximă de creştere a biomasei	h^{-1}
α	— parametru, ec. (11)	
β	— parametru, ec. (12)	

2. Ecuaţii caracteristice

În continuare, viteza procesului biochimic se consideră determinată în ipotezele unor modele nestructurate şi a comportării pseudoomogene a mediului biologic. Stoechiometria reacţiei biochimice este descrisă de ecuaţia globală:

$$S + X \rightarrow Y \cdot X + Y_1 P \qquad (1)$$

în care sînt evidenţiate substratul (S), masa biologică (X), obţinută cu randamentul Y şi metabolitul P, obţinut cu randamentul Y_1.

2.1. *Reactorul biochimic continuu ideal cu recirculaţie* (R)

Recirculaţia ideală sau amestecarea perfectă a mediului biologic poate fi realizată cu ajutorul unui sistem de agitare mecanică, prin barbotarea aerului, printr-o recirculare externă intensă a mediului biologic cu o pompă centrifugă etc. Această amestecare ideală asigură, în cazul reactoarelor continue, identitatea valorilor variabilelor de la ieşirea din reactor cu cele din volumul ocupat de mediul biologic în reactor.

Ecuaţiile caracteristice, în regim staţionar şi izoterm, sînt reprezentate de ecuaţiile de bilanţ de masă pentru biomasa X, substratul S şi metabolitul P, aplicate la scara întregului volum V al mediului biologic, alimentat cu debitul D_{V_0}, considerat constant (Fig. 1).

a) *biomasa*, X

$$D_{V_0} \cdot X_0 + v_{RX} \cdot V = D_{V_0} \cdot X \qquad (2)$$

Introducînd durata nominală [1], ecuația (2) devine:

$$t_0 = \frac{V}{D_{V_0}} = \frac{X - X_0}{v_{RX}} = \frac{X - X_0}{\mu X} = \frac{1}{D} \tag{3}$$

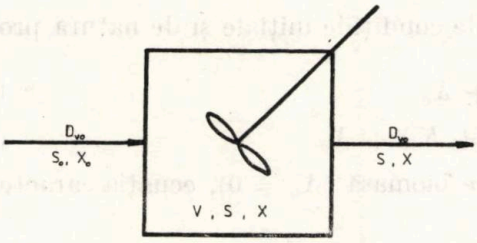


Fig. 1 — Reactorul cu amestecare perfectă, *R*.

Pentru viteza de creștere a biomasei, v_{RX}, se adoptă următoarea expresie cinetică [2]:

$$v_{RX} = \mu X \tag{4}$$

În ecuația (3), cu D s-a notat viteza de diluție care, pentru procesele continue, este egală cu viteza de creștere a masei biologice, μ[2] pentru înmulțirea celulelor prin diviziune.

Dacă se adoptă o cinetică de tip Monod, cu o valabilitate suficient de largă pentru procesele biochimice:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \tag{5}$$

ecuația (3) devine:

$$t_0 = \frac{(X - X_0)(K_s + S)}{\mu_{max} SX} \tag{6}$$

b) *substratul, S*

$$D \cdot S_0 = D_{V_0} \cdot S + v_{RS} \cdot V \tag{7}$$

În ecuația (7), v_{RS} reprezintă viteza de consum a substratului, care este legată de v_{RX}, viteza de creștere a biomasei, prin relația [1]:

$$v_{RS} = \frac{v_{RX}}{Y} \tag{8}$$

în care Y reprezintă randamentul de transformare a substratului în biomasă și este exprimat prin biomasa produsă la o unitate de masă de substrat consumată [3].

Introducînd (8) în (7) și ținînd seama de (3), ecuația (7) devine:

$$\frac{D_{V_0}}{V}(S_0 - S) = \frac{(X - X_0)}{Y \cdot t_0}$$

de unde:

$$S = S_0 - \frac{X - X_0}{Y} \tag{10}$$

Ecuația caracteristică a reactorului R pentru producerea de biomasă se obține din (3), ținînd seama de (10) :

$$t_0 = \frac{(X - X_0)(\beta - X)}{\mu_{max} X(\alpha - X)} \tag{11}$$

în care parametrii α și β depind de condițiile inițiale și de natura procesului biochimic :

$$\alpha = YS_0 + X_0 \tag{12}$$

$$\beta = Y(S_0 + K_s) + X_0 \tag{13}$$

Dacă alimentarea nu conține biomasă ($X_0 = 0$), ecuația caracteristică devine :

$$t_0 |_{X_0=0} = \frac{\beta_0 - X}{\mu_{max} (\alpha_0 - X)} \tag{14}$$

în care parametrii α și β au valorile particulare :

$$\alpha_0 = YS_0 \tag{15}$$

$$\beta_0 = Y(S_0 + K_s) \tag{16}$$

În funcție de viteza de diluție D, concentrația de biomasă la ieșirea din reactor se poate calcula cu relația [2] :

$$X = Y\left(S_0 - \frac{K_s \cdot D}{\mu_{max} - D}\right) \tag{17}$$

iar concentrația de substrat este egală cu :

$$S = \frac{K_s \cdot D}{\mu_{max} - D} \tag{18}$$

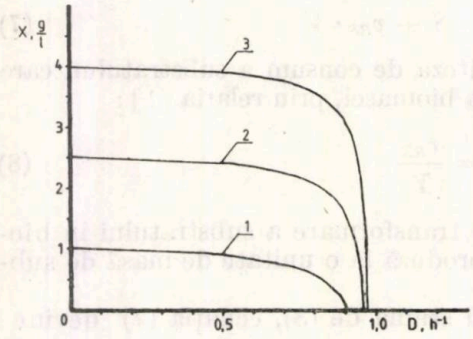


Fig. 2. Influența vitezei de diluție D, h^{-1}, asupra concentrației de biomasă X, g/l, în cazul reactorului cu amestecare perfectă. (1) $S_0 = 2$ g/l, (2) $S_0 = 5$ g/l, (3) $S_0 = 8$ g/l.

În fig. 2 este reprezentată dependența concentrației de biomasă la ieșirea din reactorul R, funcție de viteza de diluție D (ecuația 17) parametrul fiind concentrația inițială de substrat S_0. După cum se observă :

— pentru viteze de diluție mici, respectiv durate de staționare mari concentrația de biomasă la ieșirea din reactor este practic insensibilă la variația vitezei de diluție, valoarea acesteia fiind apropiată de cea maximă obținută dacă tot substratul s-ar transforma în biomasă, cu randamentul Y ;

— pentru viteze de diluție mari, concentrația de masă biologică scade accentuat cu creșterea vitezei de diluție. Datorită duratelor de

staționare mici, celulele nu se pot multiplica, deoarece doar o mică cantitate de substrat este consumată;

— există o valoare particulară a vitezei de diluție:

$$D = \mu_{max} \frac{S_0}{K_s + S_0} \tag{19}$$

pentru care concentrația de substrat la ieșirea din reactor este egală cu aceea de la intrare, ceea ce înseamnă că masa biologică este „spălată" din reactor;

— concentrația inițială de substrat, S_0, influențează atît concentrația de biomasă la ieșirea din reactor cît și viteza de diluție la care apare fenomenul de „spălare". De asemenea, se observă că, pe măsură ce S_0 crește, variația lui X crește puternic pentru intervale înguste ale duratelor nominale, (sau ale vitezelor de diluție), ceea ce implică o grijă deosebită în stabilirea debitului de alimentare, precum și în urmărirea fluctuațiilor acestuia; o creștere relativ mică a debitului poate determina eliminarea masei biologice din reactor.

2.2. *Reactorul biochimic continuu ideal cu deplasare, (D)*

Profilul plan de viteze, caracteristic circulației cu deplasare ideală presupune lipsa amestecării axiale și poate fi aproximat dacă raportul dintre înălțimea și diametrul reactorului este mare. Spre deosebire de reactorul R, variabilele au o distribuție spațială, ceea ce duce la stabilirea unor profile ale acestora în lungul reactorului.

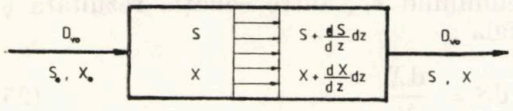


Fig. 3. Reactorul cu profil plan de viteze, D.

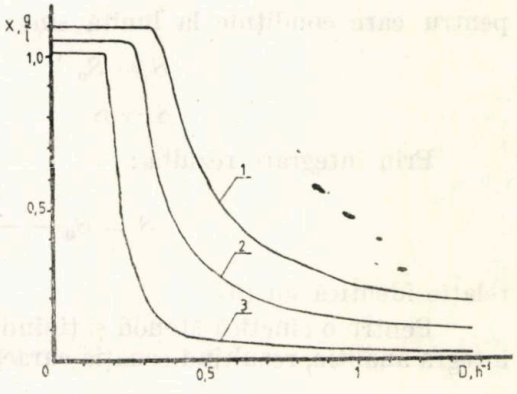


Fig. 4 — Influența vitezei de diluție D, h^{-1}, asupra concentrației de biomasă X, g/l, de la ieșirea din reactorul cu profil plan de viteze (1) $X_0 = 0.1$, (2) $X_0 = 0{,}05$, (3) $X_0 = 0.001$.

Pentru deducerea ecuației caracteristice, se pleacă de la bilanțul masic parțial, în regim staționar, pentru volumul elementar dV, ales astfel încît, atît viteza de creștere a biomasei, cît și viteza de consum a substratului să poată fi considerate constante (fig. 3).

a) *biomasa, X*

$$D_{V_0} \cdot X + v_{RX} \cdot \mathrm{d}V = D_{V_0}\left(X + \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}z} \cdot \mathrm{d}z\right) \tag{20}$$

Ecuaţia diferenţială este cu variabile separabile :

$$\frac{\mathrm{d}V}{D_{V_0}} = \frac{A \cdot \mathrm{d}z}{D_{V_0}} = \frac{\mathrm{d}X}{v_{RX}} \tag{21}$$

şi integrată pentru condiţiile la limită :

$$\begin{aligned} z &= 0 \qquad X = X_0 \\ z &= z \qquad X = X \end{aligned} \tag{22}$$

conduce la :

$$t_0 = \frac{V}{D_{V_0}} = \int_{X_0}^{X} \frac{\mathrm{d}X}{v_{RX}} \tag{23}$$

b) *substratul, S*

Bilanţul de masă pentru acelaşi element de volum este :

$$D_{V_0} \cdot S = D_{V_0}\left(S + \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}z}\right) + v_{RS} \cdot \mathrm{d}V \tag{24}$$

Introducînd (7) în (24) şi eliminînd v_{RX} între ecuaţia rezultată şi (21), se ajunge la ecuaţia diferenţială :

$$-\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}X}{Y} \tag{25}$$

pentru care condiţiile la limită sînt :

$$S = S_0 \qquad X = X_0 \tag{26}$$

$$S = S \qquad X = X \tag{27}$$

Prin integrare rezultă :

$$S = S_0 - \frac{X - X_0}{Y} \tag{28}$$

relaţie identică cu (9).

Pentru o cinetică Monod şi ţinînd seama de (7), ecuaţia (23) se poate integra analitic, rezultînd ecuaţia caracteristică pentru reactorul D.

$$t_0 = \frac{V}{D_{V_0}} = \frac{1}{D} = \frac{\beta}{\alpha \mu_{max}} \ln \left[\left(\frac{X}{X_0}\right)\left(\frac{X - \alpha}{X_0 - \alpha}\right)^{\frac{\alpha}{\beta}-1}\right] \tag{29}$$

în care parametrii α şi β au expresiile (12) şi (13).

Din examinarea ecuației caracteristice a reactorului D, rezultă că, spre deosebire de reactorul R, care poate funcționa la o concentrație de biomasă la intrare egală cu zero, după amorsarea procesului, reactorul D, datorită lipsei amestecării axiale, nu poate funcționa în lipsa biomasei la intrare.

Dependența dintre concentrația de biomasă la ieșirea din reactor și viteza de diluție este prezentată în fig. 4 în funcție de concentrația biomasei în alimentare.

După cum se observă, cu cît X_0 este mai mic, cu atît durata nominală, necesară atingerii unei concentrații impuse, crește.

În raport cu viteza de diluție, se pot deosebi trei domenii de operare :

— domeniul vitezelor de diluție mici și foarte mici (sub 0.2 h^{-1}) în care concentrația de ieșire rămîne, practic, constantă. Aceasta înseamnă că există o valoare limită a duratei de staționare peste care exploatarea reactorului nu este economică ;

— domeniul vitezelor de diluție intermediare, în care concentrația de ieșire are o variație pronunțată pentru intervale înguste ale vitezei de diluție. În acest domeniu, conducerea reactorului este dificilă, deoarece descreșteri mici ale debitului de alimentare implică scăderi mari ale concentrației de ieșire ;

— domeniul vitezelor de diluție mari (peste 1 h^{-1}), în care concentrația de ieșire, deși rămîne aproape constantă, are valori mici, neeconomice în majoritatea cazurilor.

Se observă că fenomenul de „spălare" nu se produce oricît de mult ar crește debitul de alimentare, deoarece concentrația biomasei în alimentare este diferită de zero.

2.3. *Reactorul biochimic continuu cu recirculare externă* ($D - RE$)

Dacă reactorului D i se atașează un reciclu extern (Fig. 5) prin care o parte din debitul evacuat este readus la intrarea în reactor, atunci debitul total care circulă prin zona D crește, realizîndu-se prin aceasta, în același timp, concentrația necesară de biomasă la alimentare. Sistemul poate fi alimentat, în acest caz, doar cu substrat.

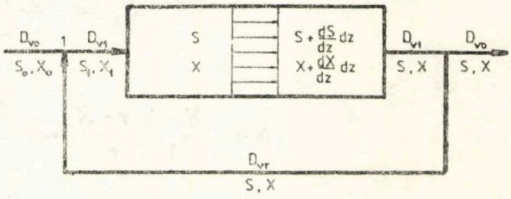


Fig. 5 — Reactorul cu recirculare externă, $D - RE$.

Pentru deducerea ecuației caracteristice, se pleacă de la ecuația bioreactorului ideal cu deplasare, aplicată zonei D și pentru cinetica Monod :

$$t_D = \frac{V}{D_{V_1}} = \frac{\beta_1}{\alpha_1 \mu_{max}} \ln \left[\left(\frac{X}{X_1} \right) \left(\frac{X - \alpha_1}{X_0 - \alpha_1} \right)^{\frac{\alpha_1}{\beta_1} - 1} \right] \qquad (30)$$

în care D_{V_1} este debitul volumetric care circulă prin zona D, iar parametrii α_1 și β_1 sînt definiți de relațiile :

$$\alpha_1 = Y \cdot S_1 + X_1 \tag{31}$$

$$\beta_1 = Y(S_1 + K_s) + X_1 \tag{32}$$

Mărimile de intrare în zona D se determină din ecuațiile de bilanț masic pentru punctul de amestecare 1.

a) *bilanț parțial, pentru biomasă, X*

$$D_{V_0} \cdot X_0 + D_{V_r} \cdot X = D_{V_1} \cdot X_1 \tag{33}$$

b) *bilanț parțial, pentru substrat, S*

$$D_{V_0} \cdot S_0 + D_{V_r} \cdot S = D_{V_1} \cdot S_1 \tag{34}$$

c) *bilanț total, pentru debitele volumetrice*

$$D_{V_0} + D_{V_r} = D_{V_1} \tag{35}$$

Parametrul modelului este factorul de recirculare, r, definit de ecu-

$$r = \frac{D_{V_r}}{D_{V_0}} \tag{36}$$

Explicitînd D_{V_1} în ecuația (35) și introducînd expresia determinată în (34), se obține

$$X_1 = \frac{r \cdot X + X_0}{1 + r} \tag{37}$$

Din ecuațiile (34) și (35) cu dependența între S și X scrisă pentru concentrațiile de amestec :

$$S = S_1 - \frac{X - X_1}{Y} \tag{38}$$

rezultă în final :

$$S_1 = \frac{S_0 + r \cdot S}{1 + r} \tag{39}$$

$$S = \frac{S_0 + r \cdot S}{1 + r} - \frac{X - \dfrac{r \cdot X + X_0}{1 + r}}{Y} \tag{40}$$

$$S_1 = S_0 - \frac{r(X - X_0)}{Y(1 + r)} \tag{41}$$

Ecuația (30) devine :

$$t_0 = \frac{V}{D_{V_0}} = (1 + r) \frac{\beta_1}{\alpha_1 \mu_{max}} \ln \left[\left(\frac{X}{X_1} \right) \left(\frac{X - \alpha_1}{X_1 - \alpha_1} \right)^{\frac{\alpha_1}{\beta_1} - 1} \right] \tag{42}$$

Nu este dificil de demonstrat că ecuația (42) se reduce asimptotic fie la ecuația reactorului R, pentru $r \to \infty$, fie la aceea a reactorului D, pentru $r \to 0$.

I. Dacă nu există recirculare externă, $r = 0$, și ecuația (42) se reduce la (29) iar parametrii α și β se calculează cu relațiile (11) și (12);

II. În cazul în care debitul de recirculare externă crește foarte mult, $r \to \infty$ în care caz este necesară rezolvarea limitei:

$$t_0 = \lim_{r\to\infty} \left\{ (1+r) \frac{\beta_1}{\alpha_1 \mu_{max}} \ln \left[\left(\frac{X}{X_1} \right) \left(\frac{X - \alpha_1}{\frac{rX + X_1}{1+r} - \alpha_1} \right)^{\frac{\beta_1}{\alpha_1}-1} \right] \right\} \tag{43}$$

Prin descompunerea într-o sumă de doi logaritmi

$$t_0 = \lim_{r\to\infty} \left[(1+r) \frac{\beta_1}{\alpha_1 \mu_{max}} \ln \left(\frac{X}{X_1} \right) \right] +$$

$$+ \lim_{r\to\infty} \left[(1+r) \frac{\beta_1}{\alpha_1 \mu_{max}} \left(\frac{X - \alpha_1}{\frac{rX + X_1}{1+r} - \alpha_1} \right)^{\frac{\alpha_1}{\beta_1}-1} \right] \tag{44}$$

utilizînd pentru limitele termenilor sumei notațiile A și B, rezultă:

$$A = e^{\frac{\beta}{X}(X - X_0)} \tag{45}$$

$$B = e^{\frac{(\alpha-\beta)(X-X_0)}{X-\alpha}} \tag{46}$$

În ecuațiile (45) și (46), s-a ținut seama că:

$$\lim_{r\to\infty} X_1 = X_0 \tag{47}$$

$$\lim_{r\to\infty} \alpha_1 = \alpha \text{ și } \lim_{r\to\infty} \beta_1 = \beta \tag{48}$$

Cu A și B determinați de ecuațiile (45) și (46) se calculează durata nominală:

$$t_0 = \frac{\ln A + \ln B}{\alpha \mu_{max}} \tag{49}$$

$$t_0 = \frac{\frac{\beta}{X}(X - X_0) + (\alpha - \beta)\frac{X - X_0}{X - \alpha}}{\alpha \mu_{max}} = \frac{\beta}{\alpha \mu_{max}} \frac{X - X_0}{X} +$$

$$+ \left(1 - \frac{\beta}{\alpha}\right) \frac{1}{\mu_{max}} \frac{X - X_0}{X - \alpha} \tag{50}$$

După prelucrări algebrice simple, ecuația (50) se reduce la (11), ecuația caracteristică reactorului R.

În fig. 6. se evidențiază influența factorului de recirculare asupra concentrației biomasei la ieșirea din reactorul cu recirculare externă,

funcţie de viteza de diluţie. Parametrii sînt factorul de recirculare şi concentraţia de biomasă la alimentare.

În ceea ce priveşte comportarea reactorului D cu recirculare externă pentru diferite valori ale parametrilor, se pot desprinde cîteva concluzii interesante :

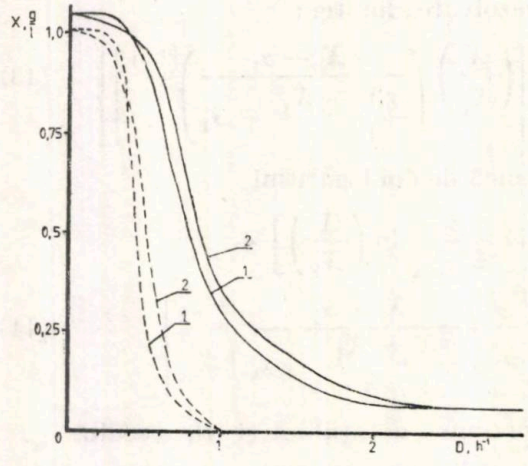


Fig. 6 — Influenţa vitezei de diluţie D, h^{-1}, asupra concentraţiei de biomasă X, g/l, de la ieşirea din reactorul cu recirculare externă (—) $X_0 = 0.05$ g/l, (— —) $X_0 = 0.001$ g/l, (1) $r = 5$, (2) $r = 50$,

— pentru realizarea unei concentraţii impuse de biomasă, la ieşirea din reactor, viteza de diluţie este direct proporţională atît cu X_0, la r constant, cît şi cu r, la X_0 constant ;

— dependenţa concentraţiei de biomasă X de viteza de diluţie devine din ce în ce mai accentuată, pe măsură ce X_0 scade. Rezultă, astfel, necesitatea supravegherii atente a funcţionării reactorului în domeniul vitezelor de diluţie intermediare (între $0.4h^{-1}$ şi $1\,h^{-1}$ în cazul de faţă) deoarece, la variaţii mici ale debitului de recirculare, apar modificări importante ale concentraţiei de biomasă la ieşire. Pe măsură ce raportul de recirculare scade (reactorul D cu recirculare exterioară se apropie de reactorul D ideal), fenomenul menţionat anterior se accentuează ;

— în domeniul vitezelor de diluţie mici şi foarte mici (sub $0.3h^{-1}$) concentraţia la ieşirea din reactor este invers proporţională cu raportul de recirculare, pentru debite constante.

2.4. *Compararea performanţelor bioreactoarelor ideale*

În reactoarele biochimice avînd o circulaţie complexă, există atît zone care pot fi considerate amestecate perfect, cît şi zone în care curgerea poate fi asimilată celei dintr-un reactor D. Este, deci, necesară compararea performanţelor celor două tipuri de bioreactoare ideale, pentru a se putea stabili influenţa hidrodinamicii asupra procesului biologic.

2.4.1. *Bioreactoarele R şi D*

Compararea performanţelor reactoarelor ideale se poate face în două moduri (parametrii de operare S_0, X_0, D_{V0}, considerîndu-se constanţi) :

a) se compară concentraţia de biomasă la ieşire, reactoarele fiind considerate de volume egale;

b) se compară volumele acestora, necesare atingerii unei concentrații de biomasă la ieșire impusă pentru ambele reactoare.

În fig. 7 a fost reprezentată concentrația de biomasă la ieșirea din reactoarele $R(-)$, respectiv $D(- -)$, funcție de viteza de diluție, pentru aceeași concentrație de biomasă în alimentare.

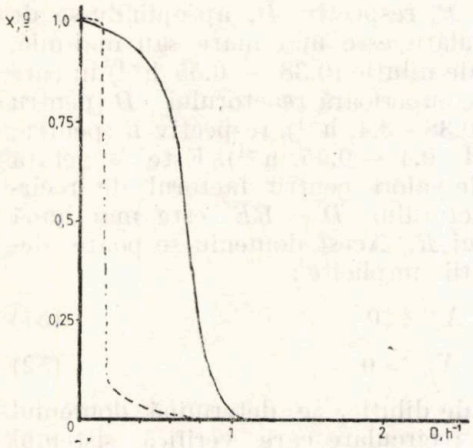


Fig. 7—Compararea performanței reactorului cu amestecare perfectă (———) și a celui cu profil plan de viteze (— — —) $X_0 = 0{,}001$ g/l.

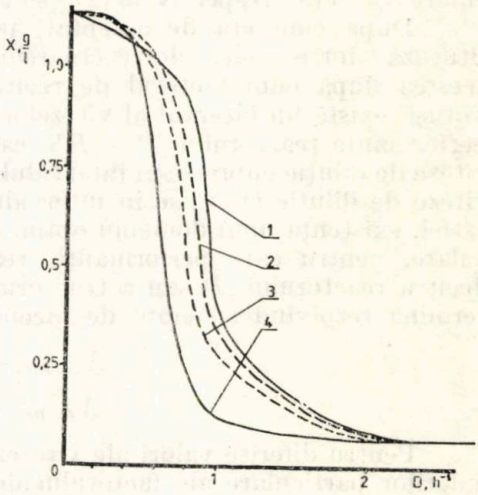


Fig. 8—Compararea performanțelor reactorului cu amestecare perfectă (1), reactorului cu recirculare externă ((2) $r = 50$, (3) $r = 5$) și reactorului cu profil plan de viteze (4). $X_0 = 0.05$ g/l.

După cum se observă, pentru viteze de diluție foarte mici (sub 0.07 h^{-1}) reactorul D, la volum egal cu reactorul R, produce o concentrație finală mai mare de biomasă. În cazul în care concentrația la ieșirea din reactor este impusă, volumul reactorului D care asigură această concentrație este mai mic decît al reactorului R. Peste această valoare a vitezei de diluție, concentrația de biomasă la ieșirea din reactorul D suferă o scădere foarte pronunțată, pentru o variație a vitezei de diluție de numai 0.03h^{-1} concentrația modificîndu-se de la aproape 1 g/l la sub 0,1 g/l. În domeniul vitezelor de diluție mijlocii și mari, reactorul R asigură o concentrație finală de biomasă mai mare decît reactorul, D, pentru același debit volumetric de alimentare și volume egale. Aceeași concentrație finală se obține pentru un volum mai mic al reactorului R față de cel necesar reactorului D. Rezultatele anterioare se explică prin caracterul autocatalitic al procesului biochimic de creștere; dacă viteza de creștere a biomasei nu a atins valoarea maximă, volumul reactorului D necesar producerii aceleiași concentrații de ieșire a biomasei este mai mare decît al reactorului R.

Dacă s-ar urmări realizarea unui volum minim de reacție pentru o concentrație finală a biomasei date, soluția ar reprezenta-o o serie de de reactoare în succesiunea $R - D$, în reactorul R procesul desfășurîndu-se la viteza maximă.

2.4.2. *Bioreactoarele R, D și D — RE*

În fig. 8 a fost prezentată concentrația finală de biomasă funcție de viteza de diluție pentru reactoarele R (1), D(4) și $D - RE$, acesta din urmă considerat pentru două valori particulare ale factorului de recirculare $r = 5$ (3), respectiv 50 (2), pentru o aceeași concentrație de biomasă.

După cum era de așteptat, performanța reactorului $D - RE$ se situează între acelea ale reactoarelor R, respectiv D, apropiindu-se de acestea după cum factorul de recirculare este mai mare sau mai mic. Totuși, există un interval al vitezelor de diluție (0.38 — 0.55 h^{-1}) în care performanța reactorului $D - RE$ este superioară reactorului D (pentru viteze de diluție cuprinse în intervalul 0,38—0.4, h^{-1}), respectiv R (pentru, viteze de diluție cuprinse în intervalul 0.4 — 0.55, h^{-1}). Este sugerată astfel, existența unui domeniu optim de valori pentru factorul de recirculare, pentru care performanța reactorului $D - RE$ este mai bună decît a reactorului D sau a reactorului R. Acest domeniu se poate determina rezolvînd sistemul de inecuații implicite:

$$X_{D-RE} - X_D > 0 \tag{51}$$

$$X_{D-RE} - X_R > 0 \tag{52}$$

Pentru diferite valori ale vitezei de diluție, se determină domeniul valorilor particulare ale factorului de recirculare care verifică sistemul (51 — 52).

3. Concluzii

Idealizarea circulației mediului biochimic permite deducerea ecuațiilor caracteristice într-un mod similar cu acela utilizat pentru reactoarele chimice. În regim staționar și izoterm, acestea sînt ecuații diferențiale ordinare pentru reactorul ideal D și reactorul cu recirculare externă $D - RE$ și ecuații algebrice pentru reactorul ideal R.

Pentru o cinetică biochimică descrisă de modelul Monod, ecuațiile diferențiale au putut fi integrate pentru condițiile la limită corespunzătoare.

Ecuațiile caracteristice au permis evidențierea:

— fenomenului de „spălare" care poate să apară la exploatarea reactorului R;

— imposibilității de funcționare a reactorului D fără microorganisme în alimentare;

— influența circulației asupra performanței reactorului și în special, sensibilitatea acestora la viteza de diluție (durata nominală).

Avînd în vedere caracterul autocatalitic al reacției biochimice, o transformare dorită poate fi realizată cu un volum minim de mediu biologic într-o serie formată dintr-un reactor R urmat de un reactor D, reactorul R fiind operat la concentrația de biomasă la ieșire corespunzătoare vitezei maxime a procesului biochimic.

Ecuațiile caracteristice, astfel deduse și prezentate sistematizat în tabelul 1, formează baza de calcul a performanțelor reactoarelor biochimice a căror circulație este descrisă prin modele de conexiuni de zone ideale.

Tabelul 1

Ecuațiile caracteristice bioreactoarelor ideale, pentru cinetica Monod

TIP DE REACTOR			Ecuații caracteristice
R		substrat	$S = S_0 - \dfrac{X - X_0}{Y}$
		biomasa	$t_0^* = \dfrac{V}{D_{V_0}} = \dfrac{(X - X_0)(\beta - X)}{\mu_{max} X (\alpha - X)}$
D		substrat	$S = S_0 - \dfrac{X - X_0}{Y}$
		biomasa	$t_0^* = \dfrac{V}{D_{V_0}} = \dfrac{\beta}{\alpha \mu_{max}} \ln \left[\left(\dfrac{X}{X_0} \right) \left(\dfrac{X - \alpha}{X_0 - \alpha} \right)^{\frac{\alpha}{\beta}} - 1 \right]$
D – RE		substrat	$S = \dfrac{S_0 + r \cdot S}{1 + r} - \dfrac{X - X_0}{(1 + r) Y}$
		biomasa	$t_0^{**} = \dfrac{V}{D_{V_0}} = \dfrac{\beta_1 (1 + r)}{\alpha_1 \mu_{max}} \ln \left[\left(\dfrac{X}{X_1} \right) \left(\dfrac{X - \alpha_1}{X_1 - \alpha_1} \right)^{\frac{\alpha_1}{\beta_1}} - 1 \right]$

$S + X \rightarrow YX$

*) $\alpha = X_0 + YS_0$
$\beta = X_0 + Y(S_0 + K_s)$

**) $\alpha_1 = X_1 + YS_1$
$\beta_1 = X_1 + Y(S_1 + K_s)$

BIBLIOGRAFIE

1. *R. Mihail, O. Muntean*, ,,Reactoare chimice", Ed. didactică și pedagogică, București 1983.
2. *A. E. Humphrey*, ,,Biochemical reaction engineering", ISCRE 5 Houston, 1978.
3. *S. Aiba, A. E., Humphrey N. Millis*, ,,Biochemical enegineering", Academic Press New York, 1973

The Caracteristic Equations of the Ideal Continuous Biochemical Reactors

The caracteristic equations of the isothermal ideal biochemical reactors are deduced according to the conservation laws of the total mass of the reactor mixture, or of the individual species. Comparing the performances of the ideal bioreactors, one can determine the influence of the circulation of liquid phase upon the process performance. Numerical investigations where carried out in the special case when a Monod-type equation was utilised for the growing kinetic of the biological species.

BOOKS

C. Samoilă, S. M. Ionescu, L. Druga, TEHNOLOGII ŞI UTILAJE MODERNE DE ÎNCĂLZIRE ÎN METALURGIE /Modern Heating Technologies and Installations in Metallurgy, Editura Tehnică, Bucureşti, 1986, 431 p.

In this paper we present some modern heating processes meant to decrease specific energetical consumptions and to obtain high quality products for leading branches of industry.

Some of the described processes such as : quick heating with exhausted gas jet, with gas radiating tubes., by self-resistance and with thermal tubes, can be applied by modifying some existing installations with rapid expense regaining and having as a result an important energetical consumption decrease.

The technical data presented in this paper referring to vacuum, plasma, flow of electrods and fluidized bed heating, can help to designing and manufacturing industrial installations which are quickly paid off on the account of high productivity, low energetical consumptions and a high quality of heated parts and tools.

In this paper we present processes theory, calculation methods, practical solutions for installation manufacturing, fields of utilization and practical examples.

Cl. Ştefănescu, L. Sofroni, C. Cosneanu, V. Covaçevici, C. Antonescu, V. Dumitrescu, Cl. Cosneanu, C. Vitănescu, ÎNDRUMĂTORUL PROIECTANTULUI DE TEHNOLOGII ÎN TURNĂTORII/Casting designer's Handbook, Vol. II, Editura Tehnică, Bucureşti, 1986, 423 p.

The second volume presents, first, data on technological design for metalls-and alloys-smelting and casting, knock-out of moulds, shaped castings fettling and thermal treatment.

Then, there are described shaped castings failings, methods of mending and quality control of the same.

The last chapter includes protection methods and work safety.

This book is meant for engineers and technicians designing and manufacturing shaped castings.

TEZE DE DOCTORAT SUSȚINUTE ÎN 1985—1986

Ioan Ciobanu — Cercetări privind influența alimentării formelor asupra calității pieselor turnate din aliaje metalice (20. IX.1985) Conducător științific prof. dr. ing. Laurentie Sofroni

Dan Trușulescu — Cercetări asupra influenței temperaturii de sfîrșit de laminare și a gradului de deformare asupra comportării la sudare a oțelurilor criogenice (14.II.1986) Conducător științific dr. ing. Iancu Drăgan

Vasilica Dina — Contribuții la studiul privind mărirea vitezei de elaborare a oțelului în convertizorul L.D. în condițiile creșterii gradului de utilizare a energiei consumate (28.II.1986) Conducător științific prof. dr. ing. Neculai Murguleț

Liviu Grecu — Contribuții la procesele de solidificare a oțelului destinat deformării plastice (11.IV.1986) Conducător științific prof. dr. ing. Silvia Vacu

Mihaela Isac — Cercetători privind specificul transformărilor structurale și modificările de proprietăți la deformarea plastică și tratamentul termic al unor oțeluri microaliate (4.VI.1986) Conducător științific dr. ing. Iancu Drăgan

Rami Saban — Cercetări privind influența factorilor structurali și a condițiilor de deformare plastică la cald și tratament termic asupra durabilității și siguranței în exploatare a unor tipodimensiuni de scule din oțeluri rapide (4.VI.1986). Conducător științific dr. ing. Iancu Drăgan

Nicolae Radu Dobrescu — Contribuții privind influența tratamentului termic în vid asupra structurii și proprietăților unor materiale metalice (3.VII.1986) Conducător științific prof. dr. ing. Nicolae Geru

RECOMANDĂRI PRIVIND CONȚINUTUL ȘI REDACTAREA MANUSCRISELOR

În vederea menținerii unui conținut corespunzător și pentru uniformizarea prezentării articolelor, la înaintarea acestora pentru publicare autorii sînt rugați să țină seama de următoarele recomandări :

1. Lucrările să fie originale și să aibă caracterul unor comunicări științifice. Se acceptă numai lucrări care nu au mai fost publicate. Nu se vor face demonstrații dezvoltate, ci se vor prezenta rezultatele și informațiile necesare în vederea aplicării acestora.

2. Se vor publica și lucrări din domeniile matematicii, fizicii și chimiei, cu deosebire dacă ele prezintă un interes deosebit pentru activitățile inginerești.

3. Manuscrisul va fi dactilografiat pe coli format A4, la 2 rînduri, cu panglică neagră, pe o singură față a foii de hîrtie. Textul integral, inclusiv figurile, nu vor depăși 8—10 pagini,

4. Titlul, dactilografiat cu majuscule și subliniat, trebuie să fie cît mai scurt.

5. Sub titlu se scriu prenumele autorilor (inițiala ; pentru autoare se va scrie prenumele întreg) și numele. Gradul didactic, titlul științific și instituția (pentru persoanele din institutul nostru se menționează numai catedra ; cînd autorii lucrează la aceeași catedră sau instituție denumirea acesteia se scrie o singură dată) se scriu într-o notă de subsol pe prima pagină.

6. Articolul va fi precedat de un rezumat de 5—6 rînduri, în limba de redactare a lucrării, dactilografiat la $1^1/_2$ rînduri.

7. Din punct de vedere redacțional, prezentarea conținutului propriu-zis se face conform STAS 8660-70, folosindu-se exprimarea impersonală (persoana a 3-a). Textul va fi dactilografiat cît mai este fără să abunde în cuvinte despărțite. La început de aliniat se lasă un spațiu de 7 semne.

8. Titlul subcapitolelor se scrie cu majuscule și nesubliniat.

9. Formulele se scriu, pe cît posibil, la mașină ; în rest, vor fi scrise de mînă, cu tuș negru, foarte citeț. Numerele pentru identificarea relațiilor matematice se scriu între paranteze rotunde, în partea dreaptă a paginii.

10. Tabelele vor avea titlu și vor fi numerotate în ordine.

11. Desenele se execută în tuș negru, pe hîrtie de calc, iar explicațiile se scriu cu șablonul. Legenda fiecărei figuri (dacă există) va fi prezentată într-un borderou de figuri, pe o foaie separată.

12. Bibliografia se scrie la sfîrșitul articolului, după capitolul de Concluzii, nu pe pagină separată, conform STAS 6158-70. Pentru prescurtarea titlurilor de publicații periodice se va consulta STAS 6074-74 și listele din revistele de referate. Citarea bibliografiei se face astfel : 1) pentru cărți : inițiala și numele autorilor, titlul , editura, orașul, anul ; 2) pentru periodice : inițiala și numele autorilor, titlul articolului, titlul periodicului, numărul, anul.

13. După bibliografie se mai prezintă un rezumat, dactilografiat la $1^1/_2$ rînduri : într-o limbă străină (rusă, engleză, germană, franceză) — dacă lucrarea este redactată în limba română, respectiv în limba română — dacă lucrarea este redactată într-o limbă străină (rusă, engleză, germană, franceză). Rezumatul va fi precedat de titlul lucrării în limba de redactare a rezumatului.

14. La depunerea lucrării, autorii vor prezenta o declarație din care să reiasă că nu conține secrete de stat.

Lucrarea urmează să fie publicată după recomandarea acesteia de către 2 referenți desemnați de comitetul de redacție.

COMITETUL DE REDACȚIE

I. P. Informația cd 2704

40430